



Fission des noyaux lourds : étude microscopique des barrières de fission et du moment angulaire des fragments

Ludovic Bonneau

► To cite this version:

Ludovic Bonneau. Fission des noyaux lourds : étude microscopique des barrières de fission et du moment angulaire des fragments. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, 2003. Français. NNT : . tel-00005374

HAL Id: tel-00005374

<https://theses.hal.science/tel-00005374>

Submitted on 18 Mar 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

PRÉSENTÉE À

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

ÉCOLE DOCTORALE DE

SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

par M. LUDOVIC BONNEAU

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

SPECIALITÉ : PHYSIQUE NUCLÉAIRE

**FISSION DES NOYAUX LOURDS : ÉTUDE MICROSCOPIQUE DES
BARRIÈRES DE FISSION ET DU MOMENT ANGULAIRE DES FRAGMENTS**

Soutenue le 25 novembre 2003

Après avis de MM.

F. Gönnenwein

J. Meyer

Rapporteurs

Devant la commission d'examen formée de :

M. H. Jouin,

Pr, Université Bordeaux 1

Président, rapporteur

MM. J.-F. Berger,

Physicien, CEA Bruyères-le-Châtel

Examineurs

F. Gönnenwein,

Pr, Université de Tübingen (Allemagne)

J. Meyer,

Pr, Université Claude Bernard de Lyon

I. N. Mikhaïlov,

Pr, JINR Dubna (Russie)

P. Quentin,

Pr, Université Bordeaux 1

Je tiens en premier lieu à remercier vivement MM. Friedrich Gönnerwein et Jacques Meyer d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ce travail, malgré des délais assez courts, ainsi que pour leurs remarques enrichissantes.

Cette thèse a été effectuée dans le groupe de Physique Théorique du CENBG. Que son responsable, qui a également été mon directeur de thèse, et tous ses membres soient assurés du plaisir que j'ai eu à y travailler pendant ces trois années.

J'adresse également tous mes remerciements à M. Hervé Jouin pour avoir présidé ce jury, ainsi qu'à MM. Jean-François Berger et Igor N. Mikhaïlov d'avoir accepté de participer à cette commission d'examen.

Je souhaite témoigner toute ma reconnaissance envers M. Philippe Quentin pour m'avoir efficacement guidé tout au long de cette thèse et s'être montré disponible même lorsque son emploi du temps était chargé (notamment lors de la rédaction de ce manuscrit). J'ai beaucoup apprécié nos discussions qui se sont révélées, pour moi, très fructueuses et enrichissantes. De façon moins formelle je souhaite vivement remercier M. Quentin pour m'avoir fait découvrir Los Alamos et ses environs, lors de mon séjour au LANL dont je garde un très vif souvenir (en particulier des rencontres enrichissantes de MM. D. D. Strottman, M. B. Chadwick, G. M. Hale, D. G. Madland, P. Möller, A. Iwamoto et A. J. Sierk).

Ce travail doit beaucoup à David Samsœn, non seulement pour m'avoir initié à \LaTeX et à PAW, mais surtout pour nos très fructueuses discussions scientifiques (ou plutôt mes incessantes questions de théoricien débutant devrais-je dire) et pour son amitié. Qu'il trouve ici l'expression sincère de ma profonde gratitude. Merci aussi à Hristo Lafchiev pour nos discussions éclairantes, toujours dans la bonne humeur, et son enthousiasme indéfectible, ainsi qu'à Thuy Long Ha, avec qui il m'a toujours été agréable et profitable de travailler. Je souhaite également remercier Jean Libert pour toutes nos discussions sur la Physique mais aussi et surtout sur les problèmes algorithmiques et numériques soulevés par HTDA. Enfin, pour les éclaircissements sur certains aspects expérimentaux, je tiens à remercier vivement Gérard Barreau.

Cette thèse a été rendue très agréable par l'ambiance qui régnait autour de la machine à café du Château, à la cantine du CENBG et dans l'ensemble du laboratoire en général. Je remercie donc les thésards du CENBG : Christine, Cécile, Mickaël (merci beaucoup pour m'avoir patiemment expliqué les P_f !), Manu, Roland (merci beaucoup pour le baptême en planeur!), Seb, Camille, Jilian, Philippe, et les autres ... Pour avoir accepté de partager son bureau avec moi et m'avoir supporté pendant deux ans et demi, je remercie Sébastien Lemaire (mais aussi pour m'avoir fait découvrir le sympathique "Cow Girl" de Santa Fe!).

Enfin, je tiens à remercier mes parents, mes grands-parents, ma sœur et ma marraine pour leur efficace soutien moral (et logistique!).

Table des matières

INTRODUCTION	1
Première partie CALCULS STATIQUES DE BARRIÈRES DE FISSION	7
CHAPITRE I	
Formalisme	9
I.1 Champ moyen à l'approximation de Hartree-Fock-Skyrme	9
I.2 Corrélations d'appariement à l'approximation BCS	19
I.3 Calculs variationnels sous contrainte	23
I.4 Corrélations d'appariement à l'approximation HTDA	26
I.5 Traitement approché de la dépendance de l'appariement dans un mode collectif	29
CHAPITRE II	
Aspects numériques	33
II.1 Effets de troncature de la base d'oscillateur harmonique	33
II.2 Effets de troncature de la décomposition de Fourier	37
II.3 Intégration numérique	38
II.4 Base à deux centres	39
II.5 Comparaison des résultats de calculs avec les deux bases	41
Appendices	45
II.A Construction des polynômes orthogonaux $P_n(\xi)$	46
II.B Détermination des racines d'un polynôme de parité bien définie	48
CHAPITRE III	
Résultats des calculs HF+BCS de barrières de fission	49
III.1 Calculs restreints aux symétries axiale et de réflexion	50
III.2 Etude systématique des isotopes pairs du Fm	52
III.3 Effets des brisures de symétries sur les barrières de fission	53
III.4 Effet de la force de pairing sur les barrières de fission	56
III.5 Effet de la dépendance en déformation de l'appariement	57
III.6 Conclusion sur les calculs HF+BCS de barrières de fission	57

CHAPITRE IV

Résultats des calculs HTDA de barrières de fission 71

IV.1	Comparaison entre HTDA et BCS sans correction de la dépendance en déformation	71
IV.2	Effet de la dépendance en déformation de l'appariement	73

Deuxième partie SPIN DES FRAGMENTS DE FISSION 75

CHAPITRE V

Calculs de configurations de scission 77

V.1	Surface d'énergie potentielle de déformation au-delà de la 2 ^{ème} barrière de fission	77
V.2	Configurations de scission	80
V.3	Fragmentation la plus probable	83

CHAPITRE VI

Mécanisme de pompage orientationnel 91

VI.1	Introduction et motivation	91
VI.2	Hypothèses pour un point de vue minimal	92
VI.3	Valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}_i^2$ d'un fragment dans l'état du système total . . .	93

CHAPITRE VII

Calcul de la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ intrinsèque des fragments 97

VII.1	Position du problème	97
VII.2	L'opérateur $\hat{\mathbf{J}}^2$	97
VII.3	Approche par pseudo-projection spatiale	98
VII.4	Définition de la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ intrinsèque des fragments	101
VII.5	Calcul de $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_i^{(\text{intr})}$ des fragments	102
Appendices		104
VII.A	Eléments de matrice de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}$ et de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2$	105
VII.B	Calcul des intégrales $Z_{ijk}^{(A)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i})$	110
VII.C	Calcul des intégrales $R_{ijk}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda')$	113

CHAPITRE VIII

Application du pompage orientationnel au spin des fragments 115

VIII.1	Calcul du spin des fragments par pompage orientationnel	115
VIII.2	Energie d'excitation totale des fragments et multiplicité totale des neutrons de post-scission	117
VIII.3	Résultats et discussion	122

CONCLUSIONS – PERSPECTIVES 127**Annexes 129**

ANNEXE A

La distribution δ de Dirac **131**

A.1	Définitions et notations	131
A.2	Propriétés	132

ANNEXE B

Polynômes d'Hermite et de Laguerre associés **137**

ANNEXE C

Moments multipôlares d'un noyau fissionnant à symétrie axiale **141**

C.1	Moments relatifs au noyau fissionnant	142
C.2	Moments relatifs aux fragments de fission	144
C.3	Relation entre les moments quadripolaires des fragments et du système total	146

ANNEXE D

Propriétés de l'opérateur de renversement du temps **149**

D.1	Définition générale dans l'espace des états à une particule de spin non nul	149
D.2	Généralisation à N particules de spin non nul	150
D.3	Eléments de matrice de moment angulaire et renversement du temps . .	150

ANNEXE E

Théorème de Wick faible généralisé **153**

E.1	Contractions	153
E.2	Valeur moyenne d'un opérateur à N corps dans le vide de particules . .	154
E.3	Valeur moyenne d'un opérateur à N corps dans le quasi-vide de BCS .	154

ANNEXE F

Calcul du potentiel coulombien direct **157****Table des figures** **161****Liste des tableaux** **165****Bibliographie** **167**

INTRODUCTION

Le processus de fission nucléaire est un des phénomènes les plus riches que peut subir un noyau atomique comme en témoigne le nombre considérable d'études tant expérimentales que théoriques qui lui ont été consacrées depuis sa première mise en évidence en 1939 par O. Hahn, F. Strassman et L. Meitner à la suite de nombreuses expériences utilisant les neutrons, découverts peu de temps auparavant par J. Chadwick [1].

De la découverte de la fission aux calculs de barrières de fission

Des travaux impliquant différents groupes entre 1934 et 1938 sur le problème de la radioactivité dans l'Uranium et le Thorium induite par neutrons (citons notamment E. Fermi, E. Amaldi, O. D'Agostino F. Rasetti et E. Segrè de Rome [2], L. Meitner, O. Hahn et F. Strassman de Berlin [3], et le groupe de Paris avec en particulier I. Curie et P. Savitch [4] et F. Joliot), conduisirent O. Hahn et F. Strassman à étudier de façon approfondie les propriétés des produits de l'irradiation d' ^{238}U par des neutrons [5]. Ces produits étaient interprétés comme des isotopes artificiels du Radium avec toutefois un processus de formation anormal (en deux temps : réaction (n, α) puis émission α spontanée). Mais ils établirent que ces éléments présentaient en fait les caractéristiques chimiques du Baryum. Après une correspondance avec O. Hahn, L. Meitner ¹ et O. R. Frisch [6] comprirent que ce nouveau phénomène, la fission d'un noyau en deux fragments, pouvait s'interpréter dans le cadre du modèle nucléaire de la goutte liquide chargée discuté par N. Bohr et F. Kalckar en 1937 [7]. Néanmoins, c'est à N. Bohr et J. A. Wheeler que l'on doit la première étude théorique complète du phénomène de fission [8]. Pour sa découverte de la fission de noyaux lourds, O. Hahn reçut le prix Nobel de Chimie en 1944. Il convient de préciser que I. Tacke-Noddack proposa en 1934, sans toutefois avoir effectué d'expérience pour tester cette hypothèse [9], une explication alternative à celle de E. Fermi radicalement nouvelle au problème ci-dessus selon laquelle le bombardement de neutrons pourrait casser le noyau cible [10]. Une des raisons pour lesquelles cette hypothèse n'a pas été prise en considération est la non reconnaissance de sa découverte en 1925 (avec W. Noddack et O. Berg) de l'élément $Z = 43$ [11], qui a été interprété plus tard comme un produit de la fission spontanée de l'isotope ^{238}U [12] ².

Le modèle macroscopique de N. Bohr et J. A. Wheeler a permis de calculer l'énergie libérée au cours d'une réaction de fission ainsi que de préciser le concept de barrière de fission. Malgré sa simplicité, ce modèle rend compte de l'augmentation de la fissilité quand Z^2/A croît et reproduit assez bien l'évolution des hauteurs des barrières de fission

¹Après 30 ans de travail à Berlin, Lise Meitner dut quitter l'Allemagne en 1938 en raison de son origine non totalement « aryenne » et se rendit à Stockholm où un poste lui était proposé.

²Ce paragraphe s'est inspiré de la référence [13].

en fonction du paramètre de fissilité $x = \frac{a_C}{2a_S} Z^2/A$ où a_C et a_S désignent respectivement le coefficient de surface et le coefficient du terme coulombien de la formule de masse de Bethe et Weizsäcker [14]. Ceci provient de l'étude que Lord Rayleigh a effectuée à la fin du XIX^{ème} siècle sur la stabilité d'une goutte liquide sphérique uniformément chargée vis à vis des déformations quadrupolaires [15]³. Depuis l'élaboration du modèle de N. Bohr et J. A. Wheeler, de nombreux calculs de surface d'énergie de déformation ont été effectués dans ce cadre, notamment par S. Cohen et W. J. Swiatecki [16]. Toutefois, malgré plusieurs raffinements comme ceux de W. D. Myers et W. J. Swiatecki [17] (concernant notamment les effets de diffusivité de la surface nucléaire), ce modèle ne permettait pas d'expliquer l'asymétrie de masse des fragments de fission de la majorité des actinides, dont on savait qu'elle était due aux effets de couches, mis en évidence à la fin des années 40 [18]. De plus, il ne pouvait reproduire les moments quadrupolaires élevés des terres rares et des noyaux lourds. Etendant le modèle en couches sphériques aux noyaux déformés, dont l'existence avait été suggérée par J. Rainwater [19] en 1950, S. G. Nilsson, dans un modèle de particules indépendantes [20], ainsi que A. Bohr et B. Mottelson dans le cadre de leur modèle unifié [21], ont pu montrer que la déformation d'équilibre correspond au minimum de l'énergie totale du noyau calculée en fonction de sa déformation. Par un développement de la densité nucléaire autour de son approximation semi-classique, V. M. Strutinsky établit que l'énergie totale du noyau pouvait s'écrire comme la somme de l'énergie de goutte liquide, donnant la valeur moyenne de l'énergie, et d'une correction de couches responsable des fluctuations locales en fonction du nombre de nucléons et de la déformation⁴. Cette approche micro-macroscopique a été aussitôt appliquée au calcul de barrières de fission avec différents potentiels, parmi lesquels le potentiel modifié de l'oscillateur harmonique déformé utilisé par S. G. Nilsson *et al.* en 1969 [23] puis P. Möller et S. G. Nilsson en 1970, le potentiel de Woods-Saxon déformé dans les calculs de M. Brack et collaborateurs en 1972 [24] et le potentiel de Yukawa convolué employé par M. Bolsterli *et al.* la même année [25] ainsi que par P. Möller en 1972 [26] en collaboration avec J. R. Nix en 1973 [27]. L'allure à double bosse obtenue pour la courbe d'énergie de déformation permit alors à V. M. Strutinsky d'interpréter la découverte par S. Polikanov et collaborateurs en 1962 du premier isomère de fission dans l'isotope ²⁴²Am (de durée de vie 14 ms) [28]. A la même époque, les premiers calculs microscopiques des propriétés globales des noyaux (énergie de liaison, rayons de charge, déformation) par D. Vautherin et D. M. Brink [29] puis D. Vautherin [30] dans le cadre de l'approximation de Hartree-

³En tronquant le développement de l'énergie de surface $E_S(\beta)$ et l'énergie coulombienne $E_C(\beta)$ à l'ordre le plus bas en β , paramètre de déformation quadrupolaire, on trouve :

$$E_S(\beta) = E_S(0) \left(1 + \frac{2}{5} \beta^2 \right) \quad E_C(\beta) = E_C(0) \left(1 - \frac{1}{5} \beta^2 \right),$$

donc l'énergie de déformation, qui est la somme de E_S et E_C , varie comme suit aux faibles déformations :

$$E_{\text{def}}(\beta) \equiv E_S(\beta) + E_C(\beta) = E_{\text{def}}(0) + \frac{2}{5} \beta^2 E_S(0) \left(1 - \frac{E_C(0)}{2E_S(0)} \right).$$

Le rapport $E_C(0)/2E_S(0)$ est appelé paramètre de fissilité, noté x . Compte tenu que, pour une goutte sphérique uniformément chargée, l'énergie de surface est proportionnelle à $A^{2/3}$, $E_S(0) = a_S A^{2/3}$ et que l'énergie coulombienne varie comme $Z^2/A^{1/3}$, c'est-à-dire $E_C(0) = a_C Z^2/A^{1/3}$, on obtient bien $x = \frac{a_C}{2a_S} Z^2/A$.

⁴Cette idée avait été entrevue par W. D. Myers et W. J. Swiatecki [22] au voisinage seulement de la sphéricité.

Fock ont fait leur apparition et ont été étendus aux très grandes déformations par P. Quentin, H. Flocard et collaborateurs [31, 32] pour obtenir la double barrière de fission du ^{240}Pu . Dans le cadre de la théorie auto-cohérente de champ moyen avec corrélations d'appariement Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), M. Brack et P. Quentin ont apporté en 1981 une justification microscopique à l'approche de V. M. Strutinsky [33]. Depuis, de nombreux calculs HFB de barrières de fission ont été effectués, notamment par J.-F. Berger et collaborateurs (groupe de Bruyères-le-Châtel) [34, 35] et plus récemment par J. L. Egido et L. M. Robledo à spin non nul [36] puis dans des noyaux très lourds par M. Warda *et al.* [37]. Il convient de signaler que des approches relativistes de champ moyen ont été développées peu après celle de Hartree-Fock par J. D. Walecka [38] puis J. Boguta et A. R. Bodmer [39]. Elles offrent une description, sinon quantitativement raisonnable, du moins qualitativement satisfaisante des barrières de fission (voir par exemple [40]).

Le problème de la génération de moment angulaire dans les fragments de fission

Une très grande quantité de données expérimentales sur la fission ont été collectées tout au long de ces soixante cinq dernières années, permettant ainsi d'acquérir un nombre croissant de connaissances mais soulevant aussi des problèmes qui sont autant de défis pour les théoriciens. La fission est un phénomène idéal pour l'étude de la dynamique collective du problème à N corps, notamment de la réduction de $3A$ coordonnées de position à quelques variables collectives pertinentes comme l'élongation, la déformation triaxiale, l'asymétrie gauche-droite, la striction ... représentées par exemple par les moments multipôlares de la densité nucléaire Q_{20} , Q_{22} , Q_{30} et Q_{40} respectivement (du noyau fissionnant mais aussi des fragments). Récemment, des résultats expérimentaux obtenus grâce aux multi-détecteurs 4π de rayons γ de très grande sélectivité tels GAMMASPHERE et EUROBALL, couplés ou non à des détecteurs de particules chargées (les fragments) comme SAPHIR, ont permis de caractériser les fragments de fission (en déterminant leur nature, leur spin, leur énergie d'excitation) via leurs propriétés spectroscopiques bien connues et, grâce à la haute résolution des détecteurs, ont permis d'enrichir les connaissances de ces propriétés.

Actuellement, une des étapes du processus de fission la moins connue est la scission. Sa définition n'est pas exempte d'ambiguïté. Il est en outre difficile expérimentalement d'acquérir directement des informations concernant par exemple l'énergie cinétique de pré-scission, c'est-à-dire juste avant la rupture du col entre les pré-fragments. Les estimations que l'on peut rencontrer dans la littérature (voir par exemple [41]) dépendent des modèles d'analyse. De plus, la génération de moment angulaire dans les fragments de fission est une questions qui reste encore ouverte. En effet, le principal mécanisme à l'œuvre n'est pas identifié avec certitude et on ne sait pas exactement s'il intervient avant ou après la scission (ou les deux à la fois). C'est précisément ce problème que nous voulons aborder dans cette thèse.

Description microscopique de la scission

Nous nous intéressons dans ce travail à la description microscopique du point de scission, c'est-à-dire à la fonction d'onde du noyau fissionnant et à celles des fragments primaires, dans un processus de fission à basse énergie (inférieure à environ 50 MeV, c'est-à-dire à des températures de 1 à 2 MeV). Pour cela, nous adoptons l'approche microscop-

pique de champ moyen Hartree-Fock (HF) avec l'interaction effective phénoménologique de Skyrme incluant les corrélations d'appariement dans l'approximation de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS).

Cette approche n'ayant pas été appliquée jusqu'à présent très au-delà du deuxième point-selle, il n'est pas garanti qu'elle puisse offrir une description satisfaisante de la scission. Cette incertitude est non seulement d'ordre physique, puisque la force de Skyrme ajustée pour des calculs de barrières de fission [42] n'est peut-être pas adaptée aux très grandes déformations rencontrées au-delà de la deuxième barrière, mais aussi technique car la méthode approchée de résolution des équations de Hartree-Fock employée dans ces calculs [30] devient peut-être non valide. Concernant ce dernier aspect, il est légitime en particulier de se demander si la base de l'oscillateur harmonique qui sert à décomposer les fonctions d'onde individuelles est encore utilisable pour décrire des configurations à deux fragments. Par ailleurs, il est bien connu que nombre de noyaux lourds fissionnent en deux fragments de masses différentes. Il est donc apparu nécessaire dans ce travail d'étendre les calculs HF avec une force de Skyrme restreints jusqu'à présent aux formes symétriques de réflexion (symétrie dite aussi gauche-droite) en brisant cette symétrie (c'est-à-dire la symétrie de parité). C'est pour ces raisons que nous avons dû au préalable valider nos codes en comparant les résultats de nos calculs aux données expérimentales à grande déformation disponibles, essentiellement les hauteurs des barrières de fission et les énergies des isomères de fission.

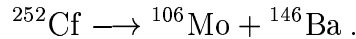
L'étude théorique quantitative du spin des fragments de fission a été entreprise dès la fin des années 60 par J. O. Rasmussen *et al.* [43] puis étendue par M. Zielinska-Pfabé et K. Dietrich [44] en termes d'excitation thermique de modes collectifs déjà considérés par J. R. Nix et W. J. Swiatecki [45], le principal étant le mode de bending. Face aux difficultés que ces modèles ont à expliquer notamment la variation de la valeur moyenne du spin des fragments avec le nombre total de neutrons émis, observée il y a quelques années par G. M. Ter Akopian *et al.* [46, 47], un modèle alternatif a été récemment proposé par I. N. Mikhaïlov et P. Quentin [48] dans lequel le rôle d'un mécanisme quantique, appelé « pompage orientationnel », de nature radicalement différente est étudié. C'est ce mécanisme que nous avons mis en œuvre dans notre approche microscopique de champ moyen HF+BCS afin de calculer le moment angulaire emporté par les fragments primaires et acquis aussitôt après la scission.

Plan d'étude

Après une présentation du formalisme HF+BCS variationnel approché avec contraintes, nous nous intéressons à deux aspects numériques cruciaux pour la description du noyau fissionnant à très grandes déformations. En particulier, en vue de notre étude de la scission, nous discutons la capacité de la base de l'oscillateur harmonique axiale traditionnelle à décrire des configurations de scission (et de post-scission) en comparant les résultats obtenus avec ceux issus d'un code développé dans ce travail utilisant une base dite « à deux centres ». Nous présentons et discutons ensuite de façon détaillée les résultats de nos calculs de courbes d'énergie de déformation. Comme on le verra, notre approche microscopique de champ moyen incluant les corrélations d'appariement fournit une description globalement satisfaisante des hauteurs des barrières de fission et des énergies des isomères de fission.

Forts de ces résultats encourageants, nous avons poursuivi notre étude en considérant des déformations plus grandes que celle du deuxième point-selle, pour calculer des confi-

gurations de scission dont nous montrons la pertinence. Il devient alors légitime d'utiliser l'approche ci-dessus comme cadre pour la mise en œuvre du mécanisme de pompage orientationnel. Après avoir présenté le modèle de I. N. Mikhaïlov et P. Quentin, il nous reste une quantité importante à calculer : la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{\mathbf{J}}^2$ des fragments à partir de l'état BCS décrivant le système total. A cause de la non localité de $\hat{\mathbf{J}}^2$, c'est une quantité dont la définition présente une certaine ambiguïté. Dans ce travail, nous proposons pour la première fois une telle définition et détaillons la méthode de calcul correspondante. Enfin, dans le but d'appliquer le modèle de génération de moment angulaire dans les fragments par pompage orientationnel et de l'utiliser pour rendre compte de la variation du spin J_{frag} des fragments, nous effectuons certaines hypothèses sur la dynamique de pré-scission et de scission, concernant notamment l'émission de neutrons. Nous pouvons ainsi calculer J_{frag} en fonction du nombre total de neutrons correspondant à une fragmentation primaire donnée. Celle que nous avons choisie est l'une des plus probables dans la fission spontanée du ^{252}Cf :



Première partie

CALCULS STATIQUES DE BARRIÈRES DE FISSION

CHAPITRE I

Formalisme

Pour décrire la structure nucléaire, nous empruntons une approche microscopique de champ moyen non relativiste dans l'approximation de Hartree-Fock avec une interaction effective phénoménologique de Skyrme, incluant un traitement approché de la brisure des symétries de translation et de rotation par des corrections à l'énergie. Au-delà du champ moyen nous ne tenons compte que des corrélations d'appariement (l'essentiel de l'interaction résiduelle) dans l'approximation de BCS et, dans certains cas, dans une approximation conservant explicitement le nombre de particules. Enfin, aspect nouveau de notre formalisme, la dépendance indirecte en déformation de la force d'appariement a été corrigée de façon approchée. Celle-ci est liée à la sélection des états individuels participant aux corrélations d'appariement.

I.1 Champ moyen à l'approximation de Hartree-Fock-Skyrme

Le système considéré est un noyau supposé isolé. Notre approche microscopique repose sur trois hypothèses essentielles :

- les nucléons sont considérés comme ponctuels : à l'échelle des énergies d'excitation du noyau envisagées ($\lesssim 50$ MeV), les effets des degrés de liberté mésoniques interviennent peu ;
- l'énergie cinétique des nucléons dans l'état fondamental du noyau ou dans des états peu excités est supposée non relativiste, puisqu'elle est due au mouvement de Fermi et vaut en moyenne $\overline{e_{\text{kin}}} \approx 20$ MeV (ce qui reste très inférieur aux énergies de masse du neutron et du proton, considérées égales entre elles et valant environ 939 MeV) : notre traitement est donc classique de ce point de vue ;
- les nucléons sont supposés interagir via un potentiel effectif phénoménologique à deux corps, contenant une contribution nucléaire dépendant de la densité et une contribution coulombienne.

Le noyau est donc caractérisé par son hamiltonien \hat{H} , dont la diagonalisation constitue le problème stationnaire à N corps nucléaire. Ce problème étant trop complexe pour que l'on puisse trouver la solution exacte, on est amené à effectuer des approximations. Dans la suite, on s'intéresse à l'état fondamental de \hat{H} . Par conséquent, la méthode privilégiée pour résoudre ce problème statique est l'application du principe variationnel de Ritz. Ce dernier fournit en effet un cadre naturel d'approximations dont la qualité dépend de la richesse (c'est-à-dire du contenu physique) de l'ensemble des fonctions d'essai. L'approximation à la base de notre formalisme est celle de Hartree-Fock. Elle consiste en un principe variationnel approché dans lequel les fonctions d'essai sont des produits de fonctions d'onde individuelles, antisymétrisés conformément au principe de Pauli (les nucléons étant des fermions), autrement dit des déterminants de Slater. C'est donc une approximation de champ moyen, en ce sens que les nucléons sont supposés indépendants et soumis chacun à un même potentiel créé collectivement. Puisque ce potentiel dépend des fonctions d'onde des nucléons, il s'agit d'un problème auto-cohérent, que l'on peut résoudre de manière itérative. En outre, les déterminants de Slater ne forment pas un sous-espace vectoriel de l'espace de Hilbert des états physiques : la solution approchée a perdu le caractère linéaire de l'équation de Schrödinger (stationnaire) initiale.

I.1 a Choix de l'interaction effective utilisée pour le champ moyen

Il est bien connu qu'une description microscopique correcte des barrières de fission des actinides et des noyaux plus lourds dépend fortement et de façon égale de deux ingrédients théoriques. Plus précisément, elle requiert une bonne reproduction à la fois de l'énergie macroscopique et de l'énergie de correction de couches par rapport aux paramètres des modes collectifs pertinents (principalement l'élongation, au moins au début du processus de fission). En effet, dans la région de déformation considérée, la variation de ces deux contributions de l'énergie totale en fonction de l'élongation, au sens du développement tronqué de Strutinsky [49], est du même ordre de grandeur (quelques MeV), en supposant une bonne reproduction des propriétés de goutte liquide sous-jacentes. Dans ce contexte et dans la mesure où les hauteurs de barrières correspondantes sont connues expérimentalement, le calcul de courbes d'énergie de déformation réalistes dans des noyaux (très) lourds constitue un double test exigeant pour toute interaction effective à employer dans l'étude des propriétés de tels noyaux (et de noyaux super-lourds).

Comme indiqué dans le paragraphe précédent, les nucléons sont supposés interagir par l'intermédiaire d'un potentiel effectif à deux corps. La nature effective de l'interaction nucléon-nucléon est en effet nécessaire pour faire de celle-ci une interaction réaliste dans les calculs de champ moyen. Brückner a montré le premier [50] comment dériver à partir de la force nue (entre deux particules « libres ») une force effective (appelée matrice G) entre deux nucléons dans la matière nucléaire, dépendant de la densité du milieu. Pour traiter les systèmes finis que sont les noyaux, Brückner *et al.* [51] ont utilisé la matrice G dans le cadre de l'approximation de la densité locale qui suppose que l'interaction effective entre deux nucléons du noyau est égale à leur interaction effective dans la matière nucléaire de densité uniforme égale à celle rencontrée dans la région d'interaction des deux nucléons (il s'agit d'une sorte de moyenne des densités aux points où se trouvent les deux nucléons interagissant). Negele [52] a construit le premier une interaction locale dépendant de la densité pour des calculs Hartree-Fock. Moyennant une renormalisation

(phénoménologique) de la matrice G pour bien reproduire simultanément l'énergie de liaison et la densité d'équilibre dans la matière nucléaire, Negele [52] puis Campi et Sprung [53] ont montré que l'interaction effective locale dépendant de la densité dérivée d'une telle matrice G fournissait des résultats satisfaisants pour les propriétés statiques (comme l'énergie de liaison et la densité nucléaire spatiale) des noyaux sphériques à l'approximation de Hartree-Fock.

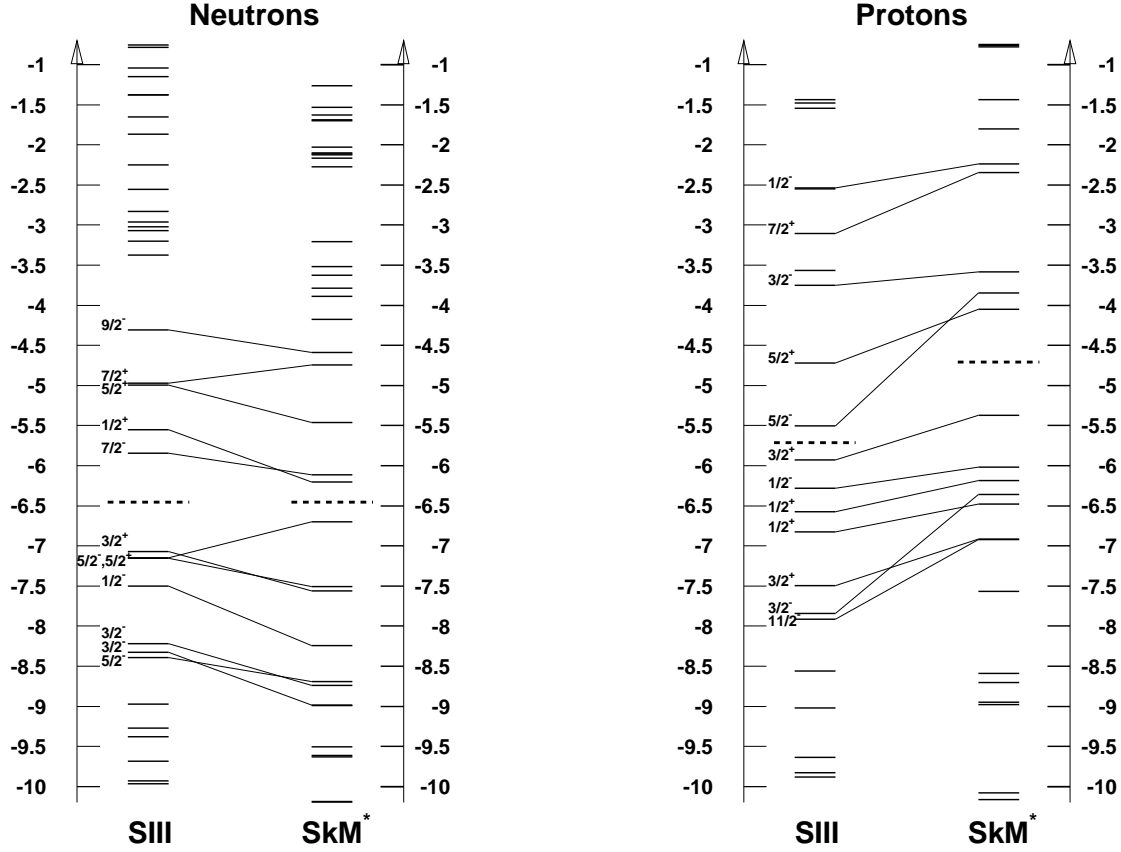


Figure I.1 — Spectres individuels des neutrons et protons dans l' ^{234}U avec les interactions de Skyrme SIII et SkM* au minimum ND. Les niveaux de Fermi sont indiqués en tirets.

Toutefois, face à la complexité de tels calculs, une approche alternative consiste à construire une force effective complètement phénoménologique capable de reproduire simultanément un ensemble donné de résultats expérimentaux le long de la vallée de stabilité β , incluant notamment l'énergie de liaison et le spectre de particules individuelles. Une telle interaction doit évidemment dépendre de la densité. Dans l'éventail des forces effectives phénoménologiques citons notamment l'interaction de Gogny [54] variant avec $\rho^{1/3}$, celle de Moskowski [55] en $\rho^{2/3}$ et les interactions de Skyrme (dont l'interaction originale [56] dépendant de ρ à la puissance 1). Nous avons choisi une de ces dernières, pas toujours astreintes à une dépendance linéaire en ρ , à la fois pour sa simplicité et pour son succès à décrire les propriétés globales des noyaux (sphériques ou déformés) dans leur

état fondamental tout le long de la vallée de stabilité β [57]. Plus précisément, comme nous nous intéressons aux très grandes déformations des noyaux lourds, nous utiliserons la paramétrisation SkM* [42] pour ses bonnes propriétés de surface. En effet, cette force a été conçue pour l'étude des barrières de fission des noyaux lourds bien qu'elle n'ait pas fait l'objet de tests extensifs à ce sujet. Elle a notamment été ajustée sur la partie semi-classique de la barrière de fission du ^{240}Pu . Au regard de la discussion sur l'importance des effets de couches, il reste à s'assurer que cette paramétrisation possède des propriétés spectroscopiques raisonnables. Pour cela, un bon test consiste à comparer les spectres individuels (neutrons et protons séparément) qu'elle fournit au fondamental d'un noyau lourd proche de la vallée de stabilité β , comme l' ^{234}U , avec les spectres obtenus avec la force de Skyrme dans sa paramétrisation SIII, dont le succès est connu pour ses très bonnes propriétés spectroscopiques. Les résultats des calculs HF+BCS (voir la section suivante pour l'approximation BCS) avec les deux forces sont présentés sur la figure I.1. La densité de niveaux pour chaque type de nucléons est sensiblement la même avec les deux forces, on peut donc raisonnablement considérer que SkM* est satisfaisante du point de vue spectroscopique. C'est donc a priori une force adaptée à notre étude de la fission.

I.1 b Equations de Hartree-Fock

Pour trouver une approximation de l'état fondamental du noyau, on utilise donc le principe variationnel restreint au sous-ensemble des déterminants de Slater, avec la contrainte de normalisation des fonctions d'onde individuelles sous forme de multiplicateurs de Lagrange, ce qui conduit à résoudre le système d'équations couplées :

$$\frac{\delta}{\delta\phi_i} \left(E[\phi_j] - \sum_{j,q,\sigma} e_j \int d^3\mathbf{r} |\phi_j(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2 \right) = 0 \quad (\text{I-1})$$

où $E[\phi_j]$ est la fonctionnelle énergie, dépendant des fonctions d'onde individuelles ϕ_j qui composent le déterminant de Slater $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$:

$$E[\phi_j] = \langle \Psi_{\text{HF}} | \hat{H} | \Psi_{\text{HF}} \rangle. \quad (\text{I-2})$$

Dans ce qui précède, la variable d'isospin repérant l'état de charge du nucléon est notée q : $q = n$ pour un neutron, $q = p$ pour un proton. Elle est implicitement contenue dans l'indice des multiplicateurs de Lagrange e_i et des fonctions d'onde individuelles $|\phi_i\rangle$. On peut montrer que le système d'équations (I-1) se met sous la forme de l'équation aux valeurs propres d'un opérateur à un corps, $\hat{h}_{\text{HF}}^{(q)}$, appelé hamiltonien de Hartree-Fock à un corps pour l'état de charge q :

$$\hat{h}_{\text{HF}}^{(q)} |\phi_i\rangle = e_i |\phi_i\rangle. \quad (\text{I-3})$$

Le multiplicateur de Lagrange e_i est donc l'énergie propre associée à l'état individuel $|\phi_i\rangle$.

Le potentiel de Skyrme que nous utilisons comme interaction effective nucléon-nucléon est un développement en \vec{k} et $\overleftarrow{k'}$ tronqué à l'ordre 2, de la forme :

$$\begin{aligned} V_{\text{Sk}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \frac{t_1}{2} (1 + x_1 P_\sigma) \left[\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \vec{k}^2 + \overleftarrow{k'}^2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] \\ & + t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \overleftarrow{k'} \cdot \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \vec{k} + \frac{t_3}{6} (1 + x_3 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \\ & + i W (\sigma_1 + \sigma_2) \cdot \overleftarrow{k'} \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \vec{k} + v_{\text{coul}}(\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|) \delta_{qp} \end{aligned} \quad (\text{I-4})$$

avec

$$\vec{k} = \frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2) \quad (\text{I-5})$$

agissant à droite et

$$\overleftarrow{k}' = -\frac{1}{2i}(\overleftarrow{\nabla}_1 - \overleftarrow{\nabla}_2) \quad (\text{I-6})$$

à gauche. Compte tenu de la forme de \hat{V}_{Sk} , la valeur moyenne du hamiltonien du noyau (\hat{K} étant l'opérateur d'énergie cinétique)

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}_{\text{Sk}} \quad (\text{I-7})$$

dans le déterminant de Slater $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$ prend la forme d'une intégrale sur les coordonnées d'espace :

$$E_0 = E[\phi_j] = \langle \Psi_{\text{HF}} | \hat{H} | \Psi_{\text{HF}} \rangle = \int d^3\mathbf{r} \mathcal{H}(\mathbf{r}), \quad (\text{I-8})$$

où $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ est une densité hamiltonienne s'exprimant, dans le cas où la symétrie de renversement du temps est conservée, selon :

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_{\text{kin}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{vol}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{surf}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{s.o}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{coul}}(\mathbf{r}). \quad (\text{I-9})$$

Dans l'ordre d'apparition, les termes du membre de droite de l'expression (I-9) sont les densités d'énergie cinétique, de volume, de surface, spin-orbite et coulombienne, avec les expressions suivantes dans le cas pair par renversement du temps (on a omis la variable \mathbf{r} pour alléger l'écriture) :

$$\mathcal{H}_{\text{kin}} = \frac{A-1}{A} \frac{\hbar^2}{2m} \tau \quad (\text{I-10})$$

$$\mathcal{H}_{\text{vol}} = B_1 \rho^2 + B_2 \sum_q \rho_q^2 + B_3 \rho \tau + B_4 \sum_q \rho_q \tau_q + B_7 \rho^{\alpha+2} + B_8 \rho^\alpha \sum_q \rho_q^2 \quad (\text{I-11})$$

$$\mathcal{H}_{\text{surf}} = B_5 \rho \nabla^2 \rho + B_6 \sum_q \rho_q \nabla^2 \rho_q \quad (\text{I-12})$$

$$\mathcal{H}_{\text{s.o}} = B_9 (\rho \operatorname{div} \mathbf{J} + \sum_q \rho_q \operatorname{div} \mathbf{J}_q) \quad (\text{I-13})$$

$$\mathcal{H}_{\text{coul}}(\mathbf{r}) = \delta_{qp} \left(\frac{1}{2} \rho_p(\mathbf{r}) V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) - V_{\text{ech}}(\mathbf{r}) \right) \quad (\text{I-14})$$

où les définitions ρ_q , τ_q et $\hat{\mathbf{J}}_q$ seront données plus loin ($\rho = \rho_n + \rho_p$, de même pour τ). Dans l'expression (I-14), le potentiel coulombien direct $V_{\text{dir}}(\mathbf{r})$ est défini par :

$$V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) = e^2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|} \quad (\text{I-15})$$

et se calcule de façon exacte comme indiqué dans l'annexe F, tandis que le terme coulombien d'échange $V_{\text{ech}}(\mathbf{r})$ est évalué dans l'approximation de Slater [58] :

$$V_{\text{ech}}(\mathbf{r}) \approx \frac{3}{4} e^2 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \rho_p^{4/3}(\mathbf{r}). \quad (\text{I-16})$$

Les constantes B_i sont des combinaisons des paramètres de Skyrme :

$$\begin{aligned}
B_1 &= \frac{t_0}{2} \left(1 + \frac{x_0}{2}\right) & B_2 &= -\frac{t_0}{2} \left(\frac{1}{2} + x_0\right) \\
B_3 &= \frac{1}{4} \left[t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) + t_2 \left(1 + \frac{x_2}{2}\right)\right] & B_4 &= -\frac{1}{4} \left[t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) - t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right)\right] \\
B_5 &= -\frac{1}{16} \left[3 t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) - t_2 \left(1 + \frac{x_2}{2}\right)\right] & B_6 &= \frac{1}{16} \left[3 t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) + t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right)\right] \\
B_7 &= \frac{t_3}{12} \left(1 + \frac{x_3}{2}\right) & B_8 &= -\frac{t_3}{12} \left(\frac{1}{2} + x_3\right) \\
B_9 &= -\frac{W}{2} .
\end{aligned} \tag{I-17}$$

En dérivant la fonctionnelle énergie (I-2), on peut, dans la représentation position, mettre $\hat{h}_{HF}^{(q)}$ sous la forme :

$$\hat{h}_{HF}^{(q)} = -\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2 m_q^*(\mathbf{r})} \nabla + U_q(\mathbf{r}) + \nabla W_q(\mathbf{r}) \cdot (-i \nabla \times \hat{\sigma}) \tag{I-18}$$

Le premier terme de $\hat{h}_{HF}^{(q)}$ est appelé terme de masse effective (notée $m_q^*(\mathbf{r})$), le second est le potentiel central $U_q(\mathbf{r})$ (contenant le potentiel coulombien U_{coul}) tandis que le troisième contient le potentiel spin-orbite $W_q(\mathbf{r})$. Ils sont définis respectivement par :

$$\frac{\hbar^2}{2 m_q^*} = \frac{\hbar^2}{2 m} + B_3 \rho + B_4 \rho_q \tag{I-19}$$

$$\begin{aligned}
U_q &= \delta_{qp} U_{\text{coul}} + 2(B_1 \rho + B_2 \rho_q) + B_3 \tau + B_4 \tau_q \\
&\quad + 2(B_5 \nabla^2 \rho + B_6 \nabla^2 \rho_q) \\
&\quad + (2 + \alpha) B_7 \rho^{1+\alpha} + B_8 [\alpha \rho^{\alpha-1} (\rho_n^2 + \rho_p^2) + 2 \rho^\alpha \rho_q] \\
&\quad + B_9 (\text{div} \mathbf{J} + \text{div} \mathbf{J}_q)
\end{aligned} \tag{I-20}$$

$$\nabla W_q = -B_9 (\nabla \rho + \nabla \rho_q) + \frac{1}{8} (t_1 - t_2) \mathbf{J}_q \tag{I-21}$$

où le potentiel coulombien U_{coul} prend la forme :

$$U_{\text{coul}} = V_{\text{dir}} - e^2 \left(\frac{3}{\pi} \rho_p \right)^{1/3} . \tag{I-22}$$

Les trois termes ci-dessus font intervenir les densités nucléoniques ρ_q , d'énergie cinétique τ_q et de spin-orbite \mathbf{J}_q s'exprimant en terme des fonctions d'onde individuelles selon :

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \sum_{k,\sigma} |\phi_k(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2 \tag{I-23}$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_{k,\sigma} |\nabla \phi_k(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2 \tag{I-24}$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = -i \sum_{k,\sigma} (\phi_k(\mathbf{r}, \sigma, q))^* \nabla \phi_k(\mathbf{r}, \sigma', q) \times \langle \sigma | \hat{\sigma} | \sigma' \rangle . \tag{I-25}$$

Vautherin et Brink ont montré que la contribution de la densité de spin-orbite à ∇W_q est faible [29]; elle est donc négligée dans la suite. En développant les fonctions d'onde individuelles sur une base $\varphi_\alpha(\mathbf{r}, \sigma)$:

$$\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, q) = \chi_q \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{(i)} \varphi_{\alpha}(\mathbf{r}, \sigma) \quad (\text{I-26})$$

où χ_q est la fonction d'isospin, on trouve que les coefficients $C_{\alpha}^{(i)}$ sont les composantes du vecteur propre de \hat{h}_{HF} associé à la valeur propre e_i :

$$\sum_{\beta} h_{\alpha\beta}^{(q)} C_{\beta}^{(i)} = e_i C_{\alpha}^{(i)} \quad (\text{I-27})$$

avec

$$h_{\alpha\beta}^{(q)} = \langle \varphi_{\alpha} | \hat{h}_{HF}^{(q)} | \varphi_{\beta} \rangle = \int d^3\mathbf{r} \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, \sigma) \hat{h}_{HF}^{(q)} \varphi_{\beta}(\mathbf{r}, \sigma) . \quad (\text{I-28})$$

La résolution des équations de Hartree-Fock se ramène ainsi à la diagonalisation du hamiltonien $h_{\alpha\beta}^{(q)}$ dans la base φ_{α} , séparément pour chaque état de charge. Pour plus de détails techniques sur l'approximation de Hartree-Fock, le lecteur est invité à consulter par exemple les références [29, 30, 59].

I.1 c Symétries brisées par le champ moyen : corrections énergétiques approchées

Le système étudié étant isolé, son impulsion totale est une constante du mouvement :

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^A \mathbf{p}_i = \text{cte} . \quad (\text{I-29})$$

Par conséquent, l'interaction entre nucléons doit être invariante dans une translation d'ensemble de toutes les particules. On peut alors montrer [60] que le mouvement du centre de masse est découplé du mouvement relatif des nucléons, autrement dit que le hamiltonien du problème à A particules (de masse m) s'écrit en fonction de la coordonnée du centre de masse \mathbf{R} (d'impulsion \mathbf{P}) et des $A - 1$ coordonnées relatives $\boldsymbol{\rho}_n$ (d'impulsions $\boldsymbol{\pi}_n$ et de masses réduites μ_n) selon :

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2mA} + \sum_{n=1}^{A-1} \frac{\boldsymbol{\pi}_n^2}{2\mu_n} + \hat{V}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_n) . \quad (\text{I-30})$$

Pour étudier le mouvement relatif des nucléons, il faut donc considérer le hamiltonien

$$\hat{H}' = \hat{H} - \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2mA} . \quad (\text{I-31})$$

Cependant, à l'approximation du champ moyen, on fait intervenir $3A$ variables dynamiques au lieu des $3(A - 1)$ variables relatives. De plus, les solutions Hartree-Fock ont une dépendance non physique en \mathbf{R} car elles sont solutions propres d'un hamiltonien à 1 corps avec potentiel attractif dans une région bornée, donc non invariant par translation par nature. La symétrie de translation est donc brisée.

D'autre part, si l'on excepte les noyaux à couches sphériques fermées, l'état du noyau fourni par l'approche de champ moyen n'est pas état propre du carré du moment angulaire total $\hat{\mathbf{J}}^2$ (éventuellement de \hat{J}_z non plus) : la symétrie de rotation est également brisée. Cela entraîne que la valeur moyenne du hamiltonien contient une énergie cinétique de rotation non physique [57], associée à un mouvement de point-zéro. Enfin, la symétrie de renversement du temps peut aussi être brisée. C'est le cas dans les noyaux impairs et impair-impairs. En fait, dans ce travail, nous ne considérons que des noyaux pair-pairs qui ne sont pas en rotation, dans lesquels cette dernière symétrie est donc conservée. Même si les brisures de ces symétries permettent d'inclure certaines corrélations à l'ordre le plus bas de la théorie, en optimisant le choix du potentiel moyen à un corps (voir [61] par exemple), il convient d'en tenir compte par des corrections à l'énergie. C'est ce que nous avons fait pour les deux symétries brisées ci-dessus.

En ce qui concerne l'invariance par translation, nous faisons l'approximation que l'énergie totale E_{tot} qui nous intéresse est donnée par la valeur moyenne de l'opérateur (I-31) dans la solution Hartree-Fock, notée $|\Psi_{HF}\rangle$:

$$E_{\text{tot}} \approx \langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle - \langle \Psi_{HF} | \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2mA} | \Psi_{HF} \rangle \quad (\text{I-32})$$

L'opérateur correctif dans l'expression (I-31) est la somme d'un opérateur à 1 corps et d'un opérateur à 2 corps séparable :

$$\hat{K}_{\text{c.m.}} = \frac{1}{2mA} \left(\sum_{i=1}^A \hat{\mathbf{p}}_i \right)^2 = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^A \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + \frac{1}{2mA} \sum_{i \neq j} \hat{\mathbf{p}}_i \cdot \hat{\mathbf{p}}_j. \quad (\text{I-33})$$

Le premier terme, à 1 corps, est l'opérateur d'énergie cinétique du système total \hat{K} divisé par le nombre de particules A (rappelons que l'on a fait l'hypothèse d'une masse égale m pour les neutrons et les protons). Or $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$ avec $\hat{K} = -\hbar^2/2m \nabla^2$, donc la contribution du terme à un corps dans (I-32) peut être prise en compte simplement en multipliant $\hbar^2/2m$ dans $\langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle$ par $1 - 1/A$. Quant au terme à 2 corps, nous l'avons omis dans la mesure où l'interaction de Skyrme que nous utilisons SkM* a été ajustée sans cette contribution. Autrement dit, l'effet du terme correctif à deux corps est en quelque sorte pris en compte par l'ajustement des paramètres de la force [62]. Par conséquent, l'énergie cinétique corrigée s'écrit :

$$E_{\text{kin}}^{(\text{corr.})} \approx \left(1 - \frac{1}{A} \right) E_{\text{kin}}. \quad (\text{I-34})$$

Bien que cette approximation soit satisfaisante pour l'étude des énergies de liaison et des rayons des noyaux le long de la vallée de stabilité β jusqu'à la masse 90 au moins (voir [62] par exemple), M. Bender *et al.* ont montré dans une étude récente [63] que la correction par évaluation exacte de la valeur moyenne de $\hat{K}_{\text{c.m.}}$ présentait d'importants effets de couches, absents dans une correction simple comme celle ci-dessus. De plus, ces auteurs ont constaté une forte influence du type de correction sur l'énergie de surface, surestimée dans l'approche omettant la contribution du terme correctif à 2 corps. Toutefois, cette surestimation semble moindre dans le cas des forces pour lesquelles le coefficient de surface a_{surf} a été explicitement contraint, comme la force SkM*.

Nous avons aussi tenu compte du mouvement rotationnel de point-zéro, associé à la brisure de symétrie de rotation, dans l'expression de l'énergie totale en lui ajoutant une

correction s'inspirant de l'approche de Lipkin [64] puis de I. N. Mikhaïlov [65] et de Kelson et Shoshani [66] de la manière suivante. L'état intrinsèque du noyau $|\Psi\rangle$ qui résulte d'un principe variationnel approché n'étant pas invariant par rotation, il se décompose comme une somme d'états propres $|\Phi_J\rangle$ (supposés normés à l'unité) du carré du moment angulaire $\hat{\mathbf{J}}^2$:

$$|\Psi\rangle = \sum_J a_J |\Phi_J\rangle . \quad (\text{I-35})$$

En toute rigueur, il conviendrait de déterminer les coefficients a_J par la méthode de projection (après variation) de Peierls et Yoccoz [67] en superposant des états intrinsèques identiques mais d'orientations différentes. C'est ce que P.-H. Heenen a effectué dans une étude récente de barrières de fission [68]. Devant l'ampleur de la tâche et puisque nous souhaitons savoir si notre approche microscopique de champ moyen est capable de décrire raisonnablement la fission jusqu'au deuxième point-selle (et au-delà), nous allons nous contenter ici d'effectuer une projection approchée afin d'obtenir l'énergie du fondamental (état 0^+ puisque nous nous intéressons à des noyaux pair-pairs). Pour cela, nous faisons l'hypothèse d'un spectre rotationnel pour les états de bon moment angulaire, autrement dit nous supposons que l'énergie E_J d'un état propre associé à la valeur propre $J(J+1)\hbar^2$ prend la forme :

$$E_J \equiv \langle \Phi_J | \hat{H} | \Phi_J \rangle = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mathcal{I}} + E_0 \quad (\text{I-36})$$

où \mathcal{I} est un moment d'inertie du noyau supposé constant dans toute la bande rotationnelle. Compte tenu de (I-35) et du fait que \hat{H} n'a d'éléments de matrice non nuls qu'à l'intérieur des différents sous-espaces propres de $\hat{\mathbf{J}}^2$ (stables par \hat{H}), l'énergie E_{def} de l'état intrinsèque déformé $|\Psi\rangle$ vaut :

$$E_{\text{def}} = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\sum_J |a_J|^2 E_J}{\sum_J |a_J|^2} . \quad (\text{I-37})$$

Or $|\Phi_J\rangle$ est état propre de l'opérateur $\hat{\mathbf{J}}^2$ associé à la valeur propre $J(J+1)\hbar^2$, donc on a :

$$\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}^2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\sum_J |a_J|^2 J(J+1)\hbar^2}{\sum_J |a_J|^2} . \quad (\text{I-38})$$

Grâce à l'expression (I-36) de E_J , la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ (I-38) devient, puisque \mathcal{I} est supposé indépendant de J :

$$\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle = 2\mathcal{I} \frac{\sum_J |a_J|^2 (E_J - E_0)}{\sum_J |a_J|^2} = 2\mathcal{I} \frac{\sum_J |a_J|^2 E_J}{\sum_J |a_J|^2} - 2\mathcal{I} E_0 . \quad (\text{I-39})$$

On en déduit que E_0 , l'énergie de l'état fondamental 0^+ est reliée à E_{def} par :

$$E_0 = E_{\text{def}} - \frac{\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle}{2\mathcal{I}} . \quad (\text{I-40})$$

Le deuxième terme de (I-40) est la correction énergétique due au mouvement rotationnel de point-zéro. En pratique, \mathcal{I} et $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle$ sont calculés de façon cohérente en ce sens qu'ils sont évalués à partir de l'état $|\Psi\rangle$ déterminé dans notre approche microscopique de champ moyen avec corrélations d'appariement (HF+BCS) (voir la section I.2 pour l'approximation BCS). Plus précisément, la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ dans un état BCS (I-56) prend la

forme établie par Sprung *et al.* [69] :

$$\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_{\text{BCS}} = \sum_{k,l}' |\langle k | \hat{j}_+ | l \rangle|^2 (u_k v_l - u_l v_k)^2 + \frac{1}{2} \sum_{k,l}'' |\langle k | \hat{j}_+ | \bar{l} \rangle|^2 (u_k v_l - u_l v_k)^2 \quad (\text{I-41})$$

tandis que le moment d'inertie \mathcal{I} est calculé par la formule de Belyaev [70] :

$$\mathcal{I}_{\text{Bel}} = \sum_{k,l}' \frac{|\langle k | \hat{j}_+ | l \rangle|^2}{E_k^{(\text{qp})} + E_l^{(\text{qp})}} (u_k v_l - u_l v_k)^2 + \frac{1}{2} \sum_{k,l}'' \frac{|\langle k | \hat{j}_+ | \bar{l} \rangle|^2}{E_k^{(\text{qp})} + E_l^{(\text{qp})}} (u_k v_l - u_l v_k)^2 \quad (\text{I-42})$$

avec les notations de la référence [69]. En particulier, \sum_k' représente la somme sur les états $|k\rangle$ états propres de j_z avec une valeur propre Ω_k positive, \sum_k'' désigne la somme sur les états $|k\rangle$ tels que $\Omega_k = 1/2$, et $E_k^{(\text{qp})}$ est l'énergie de quasi-particule associée à l'état k (voir la section I.2 pour les notations) :

$$E_k^{(\text{qp})} = \sqrt{(e_k - \lambda)^2 + \Delta_k^2}. \quad (\text{I-43})$$

Enfin, contrairement à J.-F. Berger et collaborateurs [35], nous avons négligé la contribution de l'énergie vibrationnelle de point-zéro car on s'attend à ce qu'elle n'apporte aucun effet systématique en fonction de la déformation, puisque ses fluctuations sont a priori de moyenne nulle si l'on inclut tous les modes collectifs dynamiques pertinents (élongation et déformations transverses). On ne peut toutefois exclure que ces fluctuations engendrent des variations significatives des énergies relatives (hauteurs de barrière et énergies isomériques).

I.1 d Décomposition des fonctions d'onde individuelles

En pratique, la base de décomposition des fonctions d'onde individuelles que nous utilisons est celle de l'oscillateur hamonique à symétrie axiale¹ :

$$\varphi_\alpha(\mathbf{r}, \sigma) = \chi_\Sigma \Psi_{n_z}(z) \Psi_{n_r}^\Lambda(r) \frac{e^{i\Lambda\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{I-44})$$

La fonction radiale $\Psi_{n_r}^\Lambda(r)$ est choisie de sorte que $\Phi_{n_r}^\Lambda(r, \varphi) = \Psi_{n_r}^\Lambda(r) \frac{e^{i\Lambda\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$ soit fonction propre de l'oscillateur harmonique radial :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi_{n_r}^\Lambda(r, \varphi) + \frac{1}{2} m \omega_\perp^2 r^2 \Phi_{n_r}^\Lambda(r, \varphi) = E_{n_r}^\Lambda \Phi_{n_r}^\Lambda(r, \varphi) \quad (\text{I-45})$$

avec $E_{n_r}^\Lambda = \hbar \omega_\perp (n_\perp + 1)$, $n_\perp = 2n_r + |\Lambda|$, $n_r \in \mathbb{N}$ et $\Lambda \in \mathbb{Z}$. La fonction $\Psi_{n_r}^\Lambda(r)$ normée à l'unité s'écrit alors :

$$\Psi_{n_r}^\Lambda(r) = N_{n_r}^\Lambda \sqrt{2} \beta_\perp e^{-\eta/2} \eta^{\Lambda/2} L_{n_r}^\Lambda(\eta) \quad (\text{I-46})$$

¹Une précision sémantique s'impose à ce stade. Ce qui est généralement appelé « symétrie axiale » devrait plutôt être dénommé « symétrie de révolution ». Dans le même esprit, la « symétrie triaxiale » qui reste après brisure de la symétrie axiale correspond en fait à la « symétrie ellipsoïdale », c'est-à-dire la symétrie par rapport aux trois plans principaux.

où l'on a posé $\beta_{\perp} = \sqrt{m\omega_{\perp}/\hbar}$ et $\eta = \beta_{\perp}^2 r^2$. La fonction $L_{n_r}^{\Lambda}$ est le polynôme de Laguerre modifié de degré n_r , de norme $1/N_{n_r}^{\Lambda}$ (se reporter à l'annexe B pour l'expression de $N_{n_r}^{\Lambda}$). Cette famille de polynômes orthogonaux est associée à la fonction de poids $e^{-\eta} \eta^{\Lambda}$ sur l'intervalle $[0, +\infty[$:

$$\int_0^{\infty} d\eta e^{-\eta} \eta^{\Lambda} L_{n_r}^{\Lambda}(\eta) L_{n'_r}^{\Lambda}(\eta) = \frac{\delta_{n_r n'_r}}{(N_{n_r}^{\Lambda})^2}. \quad (\text{I-47})$$

Quant à la fonction $\Psi_{n_z}(z)$, elle est fonction propre de l'oscillateur harmonique à une dimension suivant la direction z :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_{n_z}(z) + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \Psi_{n_z}(z) = E_{n_z} \Psi_{n_z}(z) \quad (\text{I-48})$$

avec $E_{n_z} = \hbar \omega_z (n_z + 1)$, $n_z \in \mathbb{N}$. La fonction $\Psi_{n_z}(z)$ normée à un s'écrit alors :

$$\Psi_{n_z}(z) = N_{n_z} \sqrt{\beta_z} H_{n_z}(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (\text{I-49})$$

où l'on a posé $\beta_z = \sqrt{m\omega_z/\hbar}$ et $\xi = \beta_z z$. La fonction H_{n_z} est le polynôme d'Hermite de degré n_z , de norme $1/N_{n_z}$ (se reporter à l'annexe B pour l'expression de N_{n_z}). Cette famille de polynômes orthogonaux est associée à la fonction de poids $e^{-\xi^2}$ sur l'intervalle $] -\infty, +\infty[$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) = \frac{\delta_{n_z n'_z}}{(N_{n_z})^2}. \quad (\text{I-50})$$

I.2 Corrélations d'appariement à l'approximation BCS

I.2 a Insuffisance de l'approximation de Hartree-Fock ²

En « seconde quantification », l'état fondamental Hartree-Fock $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$, construit à partir des états individuels $|\phi_i\rangle$ (on omet la variable d'isospin), prend la forme :

$$|\Psi_{\text{HF}}\rangle = \left(\prod_{i=1}^A a_i^{\dagger} \right) |0\rangle \quad (\text{I-51})$$

où $|0\rangle$ est le vide de particules et a_i^{\dagger} est l'opérateur de création d'une particule dans l'état $|\phi_i\rangle$:

$$a_i^{\dagger} |0\rangle = |\phi_i\rangle. \quad (\text{I-52})$$

Les états excités dans cette approximation sont donc obtenus par excitations n particules- n trous (notés np - nh). Il est bien connu que pour les noyaux magiques de tels états ont une énergie d'excitation élevée (typiquement de 4 à 6 MeV). L'état fondamental Hartree-Fock est donc loin d'être dégénéré avec les états excités à 1p-1h, et a fortiori avec ceux à 2p-2h, 3p-3h, ... Au contraire, dans un noyau non magique, les énergies d'excitation particules-trous peuvent être assez faibles pour que $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$ soit quasiment dégénéré avec les états excités. Dans ce cas, l'interaction résiduelle qui reste entre deux nucléons lorsque l'on a tenu compte du champ moyen peut coupler ces états. L'énergie issue de cette interaction à deux corps possède quatre contributions selon la valeur du spin total S et de l'isospin total T des deux nucléons interagissant, qui correspondent à $(S = 0, T = 0)$, $(S = 0, T = 1)$,

²Ce paragraphe s'est inspiré de la référence [71].

($S = 1, T = 0$) et ($S = 1, T = 1$). Pour un noyau pair-pair, la contribution dominante est celle du canal ($S = 0, T = 1$) représentant deux nucléons de même nature ayant des spins opposés. Comme elle est attractive, elle crée des paires de nucléons corrélés dans le noyau, appelées corrélations d'appariement. Ces paires sont similaires aux paires d'électrons de Cooper dans les métaux supra-conducteurs sous l'effet de l'interaction résiduelle attractive entre deux électrons produite par les oscillations du réseau cristallin. Cela suggère d'adopter comme état fondamental un état de paires indépendantes, formées à partir de deux nucléons. La théorie de champ moyen fondée sur un tel état constitue l'approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB).

I.2 b Approximation de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS)

En fait, pour décrire ces corrélations d'appariement, nous utilisons l'approche de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) [72], qui peut-être considérée comme une approximation de la théorie HFB dans laquelle on néglige des termes non-diagonaux dans la matrice de la transformation de Bogoliubov (faisant passer des états de particules de la théorie HF aux états de quasiparticules de la théorie HFB). On peut aussi la présenter de la façon suivante [73]. De manière tout à fait générale, un état de paires indépendantes de nucléons dans un noyau pair-pair peut se décomposer comme une somme de déterminants de Slater formés de paires d'états dits conjugués $|k\rangle, |\bar{k}\rangle$ (par exemple par renversement du temps) :

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{k, \bar{k}\}_A} c_{\{k, \bar{k}\}} \left(\prod_{\{j, \bar{j}\} \in \{k, \bar{k}\}_A} a_{j\bar{j}}^\dagger a_{j\bar{j}}^\dagger \right) |0\rangle \quad (\text{I-53})$$

où $\{k, \bar{k}\}_A$ désigne un ensemble de $A/2$ paires d'états conjugués parmi n paires possibles et $c_{\{k, \bar{k}\}_A}$ est l'amplitude de probabilité pour que les $A/2$ paires de l'ensemble $\{k, \bar{k}\}_A$ soient occupées et que les $n - A/2$ autres soient vides dans l'état $|\Psi\rangle$. Ce dernier est état propre de l'opérateur nombre total de particules :

$$\hat{N}|\Psi\rangle = A|\Psi\rangle \quad (\text{I-54})$$

L'approximation de BCS consiste alors à adopter une approximation de l'état (I-53) telle que la probabilité d'occupation de la paire spécifique $\{k, \bar{k}\}$, notée v_k^2 , soit indépendante de la distribution des $A/2 - 1$ autres paires. Pour cela, il faut nécessairement sommer sur le nombre de paires d'états, et perdre ainsi la propriété (I-54). On peut montrer que l'état $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle$ de la forme :

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \sum_{\substack{A=0 \\ A \text{ pair}}}^{2n} \sum_{\{j, \bar{j}\}_A} \prod_{\substack{k > 0 \\ k \notin \{j, \bar{j}\}_A}} u_k \prod_{\substack{k' > 0 \\ k' \notin \{j, \bar{j}\}_A}} v_{k'} a_{k'}^\dagger a_{\bar{k}'}^\dagger |0\rangle \quad (\text{I-55})$$

où u_k^2 est la probabilité que la paire $\{k, \bar{k}\}$ soit inoccupée, satisfait à la condition requise par l'approximation BCS. La notation $k > 0$ signifie que l'on somme sur les paires $\{k, \bar{k}\}$. L'expression (I-55) est précisément l'état de Bardeen, Cooper et Schrieffer [72] sous la forme développée, la forme factorisée étant :

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{i>0} \left(u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{I-56})$$

I.2 c Equations de BCS

Au vu de l'interprétation probabiliste des paramètres u_k et v_k , ces derniers ne sont pas indépendants, ils vérifient la relation :

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (\text{I-57})$$

lorsque l'état $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle$ (I-56) est normé à un. Pour mettre en œuvre l'approximation BCS dans le but de trouver l'état fondamental approché, on applique à nouveau le principe variationnel de Ritz en restreignant l'ensemble des fonctions d'onde d'essai à celles de la forme (I-56), dans laquelle u_i et v_i apparaissent donc comme des paramètres variationnels. Intéressons-nous à la valeur moyenne du hamiltonien \hat{H} du noyau dans l'état $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle$, autrement dit à l'énergie que l'on doit minimiser. Dans le cas où \hat{H} est composé de l'énergie cinétique (opérateur à un corps) et de l'énergie potentielle d'interaction à deux corps, il prend la forme, en seconde quantification :

$$\hat{H} = \sum_{i,j} k_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \tilde{v}_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (\text{I-58})$$

où k_{ij} est l'élément de matrice de l'opérateur d'énergie cinétique \hat{K} dans la base Hartree-Fock composée des états individuels $|\phi_i\rangle$ (notés plus brièvement $|i\rangle$), et \tilde{v}_{ijkl} est l'élément de matrice antisymétrisé de l'interaction effective à deux corps \hat{V} :

$$k_{ii} = \langle i | \hat{K} | i \rangle \quad (\text{I-59})$$

$$\tilde{v}_{ijkl} = \langle ij | \hat{V} | \tilde{kl} \rangle = \langle ij | \hat{V} | kl \rangle - \langle ij | \hat{V} | lk \rangle. \quad (\text{I-60})$$

En appliquant le théorème de Wick faible généralisé, on peut montrer (voir annexe E), que la valeur moyenne du hamiltonien (I-58) dans l'état Ψ_{BCS} (I-56) vaut :

$$\langle \Psi_{\text{BCS}} | \hat{H} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = \sum_i v_i^2 \left(k_{ii} + \frac{1}{2} \sum_j \tilde{v}_{ijij} v_j^2 \right) + \sum_{i,j>0} \tilde{v}_{i\bar{i}j\bar{j}} u_i v_i u_j v_j \quad (\text{I-61})$$

Le premier terme de (I-61) est la contribution du champ moyen corrélé (présence de facteurs v_i^2), alors que le second est un terme d'appariement pur. La variation de l'énergie (I-61) par rapport à v_i , sous la condition que le système ait en valeur moyenne le bon nombre de particules (multiplicateur de Lagrange λ pour chaque type de particules), conduit aux équations de BCS :

$$2\tilde{\epsilon}_i v_i + \Delta_i (v_i^2 - u_i^2) = 0, \quad \forall i > 0 \quad (\text{I-62})$$

avec

$$\tilde{\epsilon} = \frac{1}{2} \left[k_{ii} + k_{\bar{i}\bar{i}} + \sum_j (\tilde{v}_{ijij} + \tilde{v}_{i\bar{j}i\bar{j}}) v_j^2 \right] - \lambda \quad (\text{I-63})$$

et où la quantité Δ_i est appelée gap du niveau i , d'expression :

$$\Delta_i = - \sum_j \tilde{v}_{i\bar{i}j\bar{j}} u_j v_j. \quad (\text{I-64})$$

La condition sur le nombre moyen de particules s'écrit :

$$\langle \Psi_{\text{BCS}} | \hat{N} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2 = N \quad (\text{I-65})$$

où N est le nombre de nucléons considérés (neutrons ou protons, traités séparément). En pratique, la résolution des équations couplées (I-62) à (I-65) est effectuée de façon itérative pour un jeu donné d'états individuels Hartree-Fock $|i\rangle$. Par conséquent, elle est imbriquée dans un processus itératif de résolution des équations de Hartree-Fock, rendant ainsi cette approche auto-cohérente.

I.2 d Interactions résiduelles utilisées

Nous ne considérons que les corrélations d'appariement dans le canal $T = 1$, négligeant ainsi celles entre neutrons et protons. Etant donné la façon dont l'interaction de Skyrme est construite [56, 74], il n'y a aucune raison a priori qu'elle fournisse une description correcte de ce type de corrélations. Une interaction phénoménologique d'appariement a donc été choisie dans ce canal. Comme les contributions dominantes de l'interaction d'appariement proviennent des états autour du niveau de Fermi [59], on comprend pourquoi il apparaît raisonnable de supposer les éléments de matrice $\tilde{v}_{\bar{i}\bar{j}\bar{j}}^{\bar{i}}$ constants au voisinage du niveau de Fermi et nuls à l'extérieur. C'est le cas de la force de séniorité, que nous avons essentiellement utilisée (avec un espace de valence toutefois plus étendu en-dessous du niveau de Fermi qu'un simple voisinage, comme on le verra dans la suite). Avec des éléments de matrice constants notés g_q , aux facteurs de coupure f_i près permettant de sélectionner les états $|i\rangle$ intervenant dans la diffusion de paires autour du niveau de Fermi, elle s'exprime :

$$\langle ij|\hat{V}_G|kl\rangle = f_i f_j f_k f_l \delta_{j\bar{i}} \delta_{ik} \delta_{jl} g_q \quad (\text{I-66})$$

où chaque état possède le même isospin q et où f_i dépend de l'énergie e_i de l'état $|i\rangle$ selon :

$$f_i = \frac{1}{1 + e^{(|e_i - \epsilon_F - a| - X)/\mu}} \quad (\text{I-67})$$

avec

$$a = (E_{>} - E_{<})/2 \quad (\text{I-68})$$

$$X = (E_{>} + E_{<})/2. \quad (\text{I-69})$$

Dans les expressions précédentes, $E_{>}$ et $E_{<}$ sont les valeurs absolues maximales des énergies (comptées par rapport à l'énergie du niveau de Fermi ϵ_F) des états de particules et de trous respectivement autorisés dans l'espace de valence, et μ représente la diffusivité du facteur de coupure. Ce sont des paramètres de la force de séniorité au même titre que g_q . On appellera dans la suite intensité de la force de séniorité la quantité G_q définie par la prescription usuelle qui consiste en une renormalisation de ces valeurs par rapport au nombre de nucléons :

$$g_q = \frac{G_q}{11 + N_q} \quad (\text{I-70})$$

avec N_q le nombre de nucléons de type q . Les valeurs de G_n et G_p ont été ajustées sur le moment d'inertie à bas spin dans la bande rotationnelle normalement déformée du ^{254}No , avec un espace de valence comprenant tous les états individuels d'énergie inférieure à $\epsilon_F + 6.2$ MeV. Cela correspond à $E_{<} \geq |e_1|$ (e_1 désignant l'énergie individuelle la plus basse), $E_{>} = 6.2$ MeV et $\mu = 0$ (coupure abrupte). Les intensités suivantes ont été obtenues [75] puis utilisées dans toute notre étude :

$$G_n = 14.3 \text{ MeV et } G_p = 15.5 \text{ MeV} . \quad (\text{I-71})$$

Par ailleurs, afin de tester l'influence de l'interaction d'appariement sur les barrières de fission, une force δ (de portée nulle) indépendante de la densité a également été employée, d'expression [76] :

$$\hat{V}_\delta = \frac{V_0^{(q)}}{2}(1 + \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (\text{I-72})$$

et n'agissant qu'entre des couples d'états $|i\bar{i}\rangle$ et $|j\bar{j}\rangle$ de sorte que l'élément de matrice antisymétrisé de \hat{V}_δ s'écrit :

$$\langle ij|\hat{V}_\delta|\tilde{k}\tilde{l}\rangle = f_i f_j f_k f_l \delta_{j\bar{i}} \delta_{l\bar{k}} V_0^{(q)} \int d^3\mathbf{r} \rho_i(\mathbf{r}) \rho_j(\mathbf{r}) . \quad (\text{I-73})$$

L'intensité de cette force, c'est-à-dire $V_0^{(n)}$ et $V_0^{(p)}$, a été ajustée de façon à reproduire l'énergie de l'état isomérique 16^+ dans le ^{178}Hf [77]. Les valeurs suivantes ont été retenues :

$$V_0^{(n)} = -386 \text{ MeV.fm}^3 \text{ et } V_0^{(p)} = -498 \text{ MeV.fm}^3 . \quad (\text{I-74})$$

Associée à ces intensités, une troncature en énergie adoucie a été utilisée, définie par $\mu = 0.2 \text{ MeV}$ et $E_> = E_< = 6.5 \text{ MeV}$, donc $X = 6.5 \text{ MeV}$ (voir l'expression (I-67) de f_i ainsi que les notations de la référence [78]), où X représente la demi-largeur de la fenêtre d'excitation (dans le cas présent centrée sur le niveau de Fermi).

I.3 Calculs variationnels sous contrainte

Des calculs statiques d'énergie de déformation on peut tirer des informations sur les modes collectifs d'excitation de basse énergie du noyau. En effet, la courbure de la surface d'énergie dans une direction de l'espace des déformations donne une idée de l'énergie nécessaire pour exciter le mode collectif correspondant à cette direction.

I.3 a Variation de l'énergie sous contrainte

Pour étudier la déformabilité du noyau, on minimise la fonctionnelle énergie en contraignant un ou plusieurs opérateurs de déformation à avoir une valeur moyenne fixée dans l'état solution $|\Psi\rangle$. Nous choisissons dans cette étude les moments multipôlaire $\hat{Q}_{\ell m}$. Signalons que Warda *et al.* ont utilisé en plus un opérateur associé au nombre de nucléons dans la région d'étranglement (entre deux pré-fragments) de la forme $\hat{Q}_N = \exp(-z^2/a_N^2)$ [37]. Cela conduit à résoudre l'équation :

$$\frac{\delta}{\delta\phi_i} \left(E[\phi_i] + f(\mu_\ell, \langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle) - \sum_i e_i \int d^3\mathbf{r} |\phi_i(\mathbf{r})|^2 \right) = 0 \quad (\text{I-75})$$

où $f(\mu_\ell, \langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle)$ est une fonction de la valeur moyenne de $\hat{Q}_{\ell m}$ et d'un paramètre μ_ℓ à ajuster de sorte que $\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle$ prenne la valeur souhaitée. En choisissant une fonction f quadratique en $\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle$:

$$f(\mu_\ell, \langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle) = C_\ell (\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle - \mu_\ell)^2 , \quad (\text{I-76})$$

on cherche ainsi le point de tangence d'une parabole et de la courbe $E(\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle)$ (voir [79]). Puisque $\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle$ est de la forme :

$$\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle \equiv \int d^3\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) q_\ell(\mathbf{r}) , \quad (\text{I-77})$$

la dérivée fonctionnelle de la contrainte f s'écrit :

$$\frac{\delta}{\delta\phi_i(\mathbf{r})} f(\mu_\ell, \langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle) = 2 C_\ell (\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle - \mu_\ell) \frac{\delta \langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle}{\delta\phi_i(\mathbf{r})} \quad (\text{I-78})$$

avec :

$$\frac{\delta}{\delta\phi_i(\mathbf{r})} \langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle = \frac{\delta}{\delta\phi_i(\mathbf{r})} \left(\int d^3\mathbf{r} \sum_j \phi_j(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}) q_\ell(\mathbf{r}) \right) = \phi_i^*(\mathbf{r}) q_\ell(\mathbf{r}) \quad (\text{I-79})$$

on peut écrire la nouvelle fonctionnelle énergie comme l'intégrale sur tout l'espace de la densité d'énergie :

$$\mathcal{H}'(\mathbf{r}) = \mathcal{H}(\mathbf{r}) + 2 C_\ell (\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle - \mu_\ell) q_\ell(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) \quad . \quad (\text{I-80})$$

Ainsi, au hamiltonien $\hat{h}_{HF}^{(q)}$ s'ajoute le champ de contrainte suivant :

$$\hat{V}_{\text{contr}} = 2 C_\ell q_\ell(\mathbf{r}) (\langle \hat{Q}_{\ell m} \rangle - \mu_\ell) \quad . \quad (\text{I-81})$$

Les principaux moments multipôlaire que nous avons considérés dans notre étude des barrières de fission sont :

- le moment quadrupolaire axial Q_{20} caractérisant l'élongation du noyau fissionnant ;
- le moment quadrupolaire triaxial Q_{22} (brisure de la symétrie axiale) ;
- le moment octupolaire axial Q_{30} donnant une mesure de l'asymétrie gauche-droite (brisure de la symétrie de réflexion par rapport au plan $z = 0$, donc de la parité) et la position du centre de masse du système total, c'est-à-dire $\langle z \rangle$ compte tenu de la symétrie axiale considérée dans ce cas ;
- le moment hexadécapolaire axial Q_{40} relié à la formation d'un étranglement (ou striction).

De plus, comme il est discuté dans l'annexe C, une configuration de scission est caractérisée par la masse du fragment lourd, l'élongation de chaque fragment (supposé posséder la symétrie axiale) et la distance entre leurs centres de masse. Chacune de ces quantités peut être obtenue comme la valeur moyenne d'un opérateur (à 1 corps). Aux contraintes axiales ci-dessus, nous avons donc ajouté des contraintes sur :

- la masse A_2 et le nombre de protons Z_2 du fragment lourd (indice 2 par convention) ;
- les moments quadrupolaires $Q_{20}^{(1)}$ et $Q_{20}^{(2)}$ de chaque fragment ;
- la distance $|\langle z_1 - z_2 \rangle|$ entre les centres de masse des fragments.

I.3 b Calculs brisant la symétrie axiale

Dans les études phénoménologiques des barrières de fission [80], il a été montré que la première barrière des noyaux lourds était instable par rapport aux déformations non axiales mais stable par rapport à celles asymétriques de réflexion [27]. Ainsi le premier point-selle est abaissé lorsque l'on autorise le noyau fissionnant à explorer des formes non axiales. C'est pourquoi nous avons effectué des calculs d'énergie de déformation autour du sommet de la première barrière à l'aide du code HF+BCS triaxial et symétrique de réflexion de la référence [81]. Toutes les quantités dépendant de l'angle θ autour de l'axe de quantification z et intervenant dans ce code sont décomposées en séries de Fourier, ce qui conduit en pratique à un développement tronqué. Le nombre maximum de composantes de Fourier, noté N_F , joue un rôle semblable à N_0 qui sera étudié en détail dans le chapitre II.

Afin d'obtenir la solution triaxiale la plus basse pour une valeur donnée de l'élongation Q_{20} , une coupe correspondante de la surface d'énergie potentielle à deux dimensions est d'abord tracée. On peut en extraire un ordre de grandeur du moment quadrupolaire triaxial du minimum cherché, qui sert ensuite de point de départ pour un calcul sans contrainte sur Q_{22} . A l'issue de ce calcul, on obtient la solution d'énergie minimale dans la direction Q_{22} à Q_{20} fixé.

I.3 c Calculs brisant la symétrie de réflexion

La plupart des codes Hartree-Fock construits avec une force de Skyrme ont considéré jusqu'à présent uniquement des solutions symétriques de réflexion par rapport au plan équatorial (perpendiculaire à l'axe de fission). Par conséquent, dans ce cas, le centre de masse du noyau appartient à ce plan et est choisi comme origine du repère intrinsèque. Le plan de symétrie a donc pour équation $z = 0$ et dans ce repère attaché au noyau, la symétrie de parité est par conséquent explicitement imposée. Des études phénoménologiques [82–85] ont prédit que la seconde barrière de fission dans les actinides pouvait être abaissée lorsque le noyau est autorisé à explorer des déformations de multipolarité impaire mais qu'elle était stable par rapport aux déformations non axiales. Nous avons donc étendu notre code axial de manière à autoriser une brisure de la parité. Pour cela, nous avons supprimé la condition $f(r, z) = f(r, -z)$ pour toute fonction f intervenant dans le code symétrique et avons remplacé les intégrales de la forme

$$2 \int_0^{+\infty} f(r, z) dz \quad (\text{I-82})$$

par

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(r, z) dz . \quad (\text{I-83})$$

Cela correspond à mélanger les sous-matrices Ω^- et Ω^+ de parités différentes dans la matrice du hamiltonien Hartree-Fock à diagonaliser ($\hbar\Omega$ désignant une valeur propre de \hat{j}_z). Nous avons aussi contraint le centre de masse à coïncider avec l'origine du repère intrinsèque. Compte tenu de la symétrie axiale de nos solutions (nous ne brisons pas la symétrie de réflexion et de révolution simultanément), il suffit pour cela d'imposer que

$$\langle z \rangle = 0 . \quad (\text{I-84})$$

Afin d'étudier l'effet de la brisure de symétrie de parité sur la courbe d'énergie de déformation au voisinage de la seconde barrière de fission, nous avons ajouté une contrainte sur le moment $\hat{Q}_{\ell 0}$ axial de multipolarité ℓ impaire la plus basse (et supérieure à 1, car Q_{10} caractérise une translation du noyau par rapport à l'origine du repère), c'est-à-dire le moment octupolaire axial Q_{30} défini par :

$$Q_{30} = \int d^3\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) Y_3^0(\theta, \phi) \quad (\text{I-85})$$

avec les notations usuelles pour les harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ et où $\rho(\mathbf{r})$ est la densité nucléaire totale (i.e la somme des contributions des neutrons et des protons) dans l'espace des coordonnées. La même procédure que celle décrite dans le paragraphe I.3 b (Q_{30} jouant ici le même rôle que Q_{22} dans le cas triaxial) a été suivie pour trouver le chemin de fission passant par le deuxième point-selle.

I.4 Corrélations d'appariement à l'approximation HTDA

I.4 a Limitation de l'approximation BCS

Ainsi qu'il a été montré dans la section I.2, l'approximation BCS brise la symétrie associée au nombre de particules. Cette déficience revêt une grande importance pour les noyaux dans lesquels le produit de la densité de niveaux des états individuels près de la surface de Fermi par l'élément de matrice d'appariement moyen devient faible devant l'unité. L'approximation BCS prédit dans ce cas une quasi-disparition de l'appariement alors que l'on s'attend seulement à une atténuation de ces corrélations [86]. C'est le cas des noyaux à couches fermées (déformées ou non). Pour y remédier, une approximation conservant explicitement le nombre de particules a été récemment développée par N. Pillet, P. Quentin et J. Libert [78] pour les noyaux pair-pairs. Elle consiste à diagonaliser le hamiltonien effectif dans une base constituée de déterminants de Slater ayant le bon nombre de particules et obtenus par excitations de type particules-trous sur le vide Hartree-Fock calculé au préalable. Cette méthode peut être considérée comme une extension de l'approximation de Tamm-Dancoff (TDA) [87, 88] et est appelée en anglais « Higher Tamm-Dancoff approximation » (HTDA). Formellement, elle s'apparente à un calcul de modèle en couches fortement tronqué à ceci près que les calculs ne sont effectués que pour la partie interaction résiduelle à 2 corps du hamiltonien traitée séparément de la partie champ moyen (comme dans le traitement des corrélations d'appariement à l'approximation BCS). Il convient de souligner que cette approche est beaucoup plus complète que les approximations TDA et même RPA [89] car elle peut prendre en compte une plus grande diversité d'excitations. Elle dépasse donc le simple cadre des corrélations d'appariement. En restreignant l'espace de configuration à des excitations 2p-2h de type diffusion de paires et l'interaction résiduelle à une force delta, on ne décrit pour l'essentiel que le phénomène souhaité, l'appariement. La fonction d'onde correspondante $|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle$ est une superposition de déterminants de Slater excités par rapport à l'état fondamental Hartree-Fock, noté $|\Phi_0\rangle$. Dans le cas de la diffusion de paires, ces états excités prennent la forme :

$$a_{\beta}^{\dagger} a_{\bar{\beta}}^{\dagger} a_b a_{\bar{b}} |\Phi_0\rangle, \quad (\text{I-86})$$

où (b, \bar{b}) et $(\beta, \bar{\beta})$ désignent des paires d'états conjugués de trous et de particules respectivement. On en déduit que l'état $|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle$ est la contribution à l'état BCS (I-55), développé dans l'espace de Fock, provenant de l'espace des états à N particules (N étant la valeur propre de l'opérateur nombre de particules \hat{N} associée à l'état propre $|\Phi_0\rangle$), pour peu que l'on choisisse la même fenêtre d'excitation dans le spectre individuel. Autrement dit, avec cette restriction aux diffusions de paires et avec le même espace de valence, l'état $|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle$ correspond à la projection de l'état BCS sur le bon nombre de particules.

Il est à noter que cette méthode est actuellement étendue par T. L. Ha et P. Quentin³ en collaboration avec D. D. Strottman⁴ pour les noyaux impairs d'une part [77], par H. Lafchiev⁵ et J. Libert⁶ pour les noyaux triaxiaux et/ou en rotation d'autre part.

³Centre d'Etudes Nucléaires de Bordeaux-Gradignan (France).

⁴Theoretical Division, Los Alamos National Laboratory (USA).

⁵Institute of Nuclear Research and Nuclear Energy, (Sofia, Bulgarie).

⁶Institut de Physique Nucléaire d'Orsay (France).

I.4 b Formalisme HTDA

Le hamiltonien de Hartree-Fock étant la somme de l'énergie cinétique \hat{K} et du champ moyen $\hat{\mathcal{V}}_{\text{HF}}$, décomposons le hamiltonien effectif du noyau \hat{H} sous la forme :

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{HF}} + \hat{V}_{\text{res}} , \quad (\text{I-87})$$

où l'on a défini l'interaction résiduelle \hat{V}_{res} par :

$$\hat{V}_{\text{res}} = \hat{V} - \hat{\mathcal{V}}_{\text{HF}} . \quad (\text{I-88})$$

Appelons $|\Phi_n^{(i)}\rangle$ les déterminants de Slater obtenus à partir du plus bas d'entre eux (fondamental Hartree-Fock $|\Phi_0\rangle$) par excitations $np - nh$. L'exposant $^{(i)}$ sert à distinguer les différents états excités au même ordre d'excitation et sera omis dans la suite, en l'absence d'ambiguïté uniquement. Ces états à N corps, vecteurs propres du hamiltonien Hartree-Fock \hat{H}_{HF} , forment une base de l'espace de Hilbert du système, dans laquelle il suffit de diagonaliser l'interaction résiduelle pour connaître l'état fondamental du noyau ainsi que son énergie intrinsèque totale. Les éléments de matrice de \hat{H} s'expriment alors dans cette base selon :

$$\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle = \delta_{ij} \left(\langle \Phi_0 | \hat{H}_{\text{HF}} | \Phi_0 \rangle + e_i^* \right) + \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j \rangle \quad (\text{I-89})$$

avec e_i^* valeur propre de \hat{H}_{HF} associée au déterminant de Slater $|\Phi_i\rangle$. En posant $H_{00} = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle$ et $\langle \Phi_i | \hat{V}' | \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j \rangle + \delta_{ij} \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle$, il vient :

$$\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle = \delta_{ij} H_{00} + \left(\delta_{ij} e_i^* + \langle \Phi_i | \hat{V}' | \Phi_j \rangle \right) . \quad (\text{I-90})$$

Puisque nous utilisons une interaction de Skyrme pour déterminer le champ moyen (c'est-à-dire pour calculer H_{00} et e_i^*), qui ne décrit pas correctement les corrélations d'appariement, il nous faut choisir une interaction différente pour calculer les éléments de matrice de \hat{V}' . On fait alors l'approximation :

$$\hat{V}_{\text{res}} \approx \hat{v}_{\text{phen}} - (\hat{v}_{\text{phen}})_{\text{HF}} , \quad (\text{I-91})$$

où \hat{v}_{phen} est une interaction phénoménologique décrivant l'appariement. C'est un potentiel à 2 corps dont la contribution $(\hat{v}_{\text{phen}})_{\text{HF}}$ d'une partie des éléments de matrice à N corps $\langle \Phi_i | \hat{v}_{\text{phen}} | \Phi_j \rangle$ au champ moyen de Hartree-Fock correspond aux termes de sommation sur les états de trou de $|\Phi_0\rangle$. L'interaction choisie \hat{v}_{phen} ne doit retenir de l'interaction résiduelle totale que la partie d'appariement. C'est le cas de l'interaction δ présentée au paragraphe I.2 d. Puisque le terme en \hat{V}' dans (I-90) est le seul à contenir des corrélations d'appariement, on retrouve bien, en l'absence de corrélations :

$$\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle = \delta_{ij} (H_{00} + e_i^*) = \langle \Phi_i | \hat{H}_{\text{HF}} | \Phi_j \rangle . \quad (\text{I-92})$$

Cependant l'approximation (I-91) introduit l'inconvénient que le hamiltonien approché \hat{H}' défini par :

$$\hat{H}' = \hat{H}_{\text{HF}} + \hat{v}_{\text{phen}} - (\hat{v}_{\text{phen}})_{\text{HF}} \quad (\text{I-93})$$

possède une valeur moyenne dans l'état $|\Phi_0\rangle$ différente de celle du hamiltonien effectif de départ \hat{H} . On peut montrer que cette différence vaut :

$$\langle \Phi_0 | \hat{H}' | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | \hat{v}_{\text{phen}} | \Phi_0 \rangle . \quad (\text{I-94})$$

Pour y remédier, on ajoute à la définition (I-93) un terme proportionnel à l'opérateur identité :

$$\hat{H}' = \hat{H}_{\text{HF}} + \hat{v}_{\text{phen}} - (\hat{v}_{\text{phen}})_{\text{HF}} + (H_{00} - \langle \hat{H}_{\text{HF}} \rangle + \langle \hat{v}_{\text{phen}} \rangle) \mathbf{1} \quad (\text{I-95})$$

où $\langle . \rangle$ désigne la valeur moyenne dans l'état $|\Phi_0\rangle$. La méthode consiste ensuite à chercher la valeur propre la plus basse E_{corr} de la matrice V' et le vecteur propre associé (E_{corr} est supposée non dégénérée), afin d'obtenir l'état fondamental $|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle$ du noyau :

$$\hat{H}|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle = E_{\text{HTDA}}|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle \quad (\text{I-96})$$

avec $E_{\text{HTDA}} = H_{00} + E_{\text{corr}}$ et $\hat{V}'|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle = E_{\text{corr}}|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle$. Pour trouver la valeur propre la plus basse E_{corr} de \hat{V}' sans diagonaliser toute la matrice, une méthode de type Lancz s [90] est utilis e. La solution correspondante, not e $|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle$, se d compose sur la base $\{|\Phi_0\rangle, |\Phi_n^{(i)}\rangle\}$ selon :

$$|\Psi\rangle = \chi_0 |\Phi_0\rangle + \sum_{p \geq 1} \sum_i \chi_p^{(i)} |\Phi_p^{(i)}\rangle, \quad (\text{I-97})$$

l'indice p d signant l'ordre d'excitations particules-trous par rapport   $|\Phi_0\rangle$. En pratique, nous nous sommes restreints   $p \leq 2$. Il est int ressant de remarquer que E_{corr} est  gale   la diff rence entre la valeur moyenne du hamiltonien \hat{H} dans l' tat fondamental Hartree-Fock $|\Phi_0\rangle$ (sans corr lations d'appariement) et sa valeur moyenne dans l' tat fondamental corr l  $|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle$:

$$\langle \Psi_{\text{HTDA}} | \hat{H} | \Psi_{\text{HTDA}} \rangle - \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle = E_{\text{corr}}. \quad (\text{I-98})$$

Pour cette raison on nomme E_{corr}  nergie de corr lation.

Dans ce qui pr c de, un vide Hartree-Fock a  t  pris comme  tat de r f rence en ce sens que tous les d terminants de Slater $|\Phi_n^{(i)}\rangle$ s'obtiennent par excitations np - nh sur ce vide. Notons $|\Phi_0^{(0)}\rangle$ cet  tat. En principe, la diagonalisation de \hat{V}' dans la base compl te fournit la solution exacte du probl me, qui ne d pend alors pas du choix de $|\Phi_0^{(0)}\rangle$. N anmoins, la base doit  videmment  tre tronqu e, et l' nergie de corr lation dans l' tat fondamental $|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle$ obtenue d pend de $|\Phi_0^{(0)}\rangle$. On peut alors am liorer ce dernier en rendant auto-coh rent un tel calcul. Pour cela, on extrait de $|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle$ la densit  r duite   un corps qui sert   calculer le champ moyen   l'approximation de Hartree-Fock. Ensuite on calcule les  l ments de matrice du hamiltonien de Hartree-Fock \hat{h}_{HF} , dans lesquels interviennent les trois contributions du champ moyen (I-19)   (I-21), puis on diagonalise \hat{h}_{HF} . A partir des  tats individuels les plus bas obtenus, on construit ainsi un vide de Hartree-Fock qui sert de nouvel  tat de r f rence pour un calcul HTDA. M me si ce nouveau vide $|\Phi_0^{(1)}\rangle$ n'est plus solution du principe variationnel (l' nergie dans cet  tat est donc plus haute que dans $|\Phi_0^{(0)}\rangle$), il incorpore partiellement la contribution   un corps des corr lations contenues dans $|\Psi_{\text{HTDA}}\rangle$. Il sera donc meilleur pour le calcul HTDA   l'it ration suivante.  tant donn  que les corr lations  tudi es sont des perturbations pour la densit  r duite   un corps, celle-ci finit presque toujours par converger. A l'issue d'un calcul auto-coh rent, on obtient ainsi le meilleur vide Hartree-Fock pour le calcul des corr lations   l'approximation HTDA. Dans les calculs que nous avons effectu s et dont les r sultats seront pr sent s dans le chapitre IV, nous n'avons pas mis en  uvre un tel processus, autrement dit nous avons effectu  une seule it ration HTDA   partir d'une solution Hartree-Fock converg e. Dans les cas o  cette derni re est difficile   obtenir, nous avons introduit des corr lations d'appariement   l'approximation BCS pour faciliter la convergence puis effectu  une it ration suppl mentaire sans appariement pour extraire un vide Hartree-Fock. Notons que, dans ce

cas, ce dernier incorpore déjà partiellement l'effet à 1 corps des corrélations d'appariement, issues de l'état (I-56) de BCS.

I.4 c Interaction résiduelle d'appariement utilisée

L'interaction \hat{v}_{phen} que nous avons retenue dans le traitement ci-dessus des corrélations d'appariement est la force δ présentée au paragraphe I.2 d avec une fenêtre d'excitation et une intensité différentes. Les états individuels sélectionnés sont ceux situés à moins de $X = 3.5$ MeV du niveau de Fermi associé à $|\Phi_0\rangle$ et l'on ne retient que les configurations $np - nh$ avec $n \leq 2$ d'énergie inférieure ou égale à $E_{\text{cut}} = 2X = 7$ MeV. De plus, le facteur de diffusivité μ évoqué dans le paragraphe I.2 d, estompant l'effet d'entrée ou de sortie de niveaux dû à une variation de déformation, vaut $\mu = 0.2$ MeV dans nos calculs HTDA. Quant à l'intensité, elle a été choisie de manière à obtenir des énergies de corrélation E_{corr} au minimum ND et au sommet de la première barrière du ^{252}Cf voisines de la différence entre l'énergie totale de déformation obtenue dans un calcul Hartree-Fock sans corrélations d'appariement et celle obtenue dans un calcul HF+BCS tenant compte de ces corrélations. Les valeurs retenues de $V_0^{(n)}$ et $V_0^{(p)}$ sont :

$$V_0^{(n)} = -772 \text{ MeV.f.m}^3 \text{ et } V_0^{(p)} = -996 \text{ MeV.f.m}^3 . \quad (\text{I-99})$$

I.5 Traitement approché de la dépendance de l'appariement dans un mode collectif

Toute interaction effective utilisée pour la partie champ moyen et faisant explicitement intervenir la densité $\rho(\mathbf{r})$ dans l'espace des coordonnées (comme on peut le constater sur l'expression (I-4) du potentiel de Skyrme par exemple) dépend de la solution du problème variationnel à une déformation donnée. Bien que le hamiltonien exact du problème à N corps nucléaire soit constant de ce point de vue, une telle dépendance ne doit pas être considérée comme un effet indésirable. En effet, la dépendance en densité de l'interaction effective nucléon-nucléon correspond à une resommation partielle d'effets à N corps ($N \geq 2$) et constitue donc un moyen d'inclure des corrélations à l'ordre le plus bas de la théorie de perturbation de Goldstone (voir par exemple [59, 61]). Calculer la valeur moyenne du hamiltonien effectif associé à une déformation donnée dans l'état correspondant à une autre déformation n'est donc physiquement pas pertinent. En revanche, par la sélection des états individuels dans le traitement des corrélations d'appariement, les interactions résiduelles présentées ci-dessus dépendent indirectement de la solution alors que leurs expressions (I-66) et (I-72) ne montrent aucune dépendance explicite dans la densité. Autrement dit, d'une déformation à une autre, les états individuels retenus peuvent changer et donner lieu à des variations non physiques. Il convient alors d'estomper cet effet par une sorte de lissage. Nous en avons tenu compte de manière approchée par le raisonnement suivant, applicable à tout mode collectif caractérisé par un opérateur \hat{Q} et faisant l'objet d'une contrainte λ (dans le cas d'une contrainte linéaire, λ est le multiplicateur de Lagrange associé [79]).

Soit $\tilde{E}(\lambda)$ la valeur moyenne du hamiltonien $\hat{H}(\lambda)$, dépendant du paramètre λ supposé continu, dans l'état $|\Psi_\lambda\rangle$, solution variationnelle associée :

$$\tilde{E}(\lambda) = \langle \Psi_\lambda | \hat{H}(\lambda) | \Psi_\lambda \rangle . \quad (\text{I-100})$$

La variation de $\tilde{E}(\lambda)$ occasionnée par une petite variation de λ s'écrit au premier ordre :

$$d\tilde{E}(\lambda) = \langle \delta\Psi_\lambda | \hat{H}(\lambda) | \Psi_\lambda \rangle + h.c + \langle \Psi_\lambda | d\hat{H}(\lambda) | \Psi_\lambda \rangle . \quad (\text{I-101})$$

Or, $|\Psi_\lambda\rangle$ est solution du principe variationnel (à λ fixé) appliqué au hamiltonien contraint :

$$\delta(\langle \Psi | \hat{H}(\lambda) | \Psi \rangle - f(\lambda, \langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle)) = \langle \delta\Psi | \hat{H}(\lambda) | \Psi \rangle + h.c - \frac{\partial f}{\partial \langle \hat{Q} \rangle} d\langle \hat{Q} \rangle = 0 , \quad (\text{I-102})$$

donc l'expression (I-101) devient :

$$d\tilde{E}(\lambda) = \frac{\partial f}{\partial \langle \hat{Q} \rangle} d\langle \hat{Q} \rangle + \langle d\hat{H}(\lambda) \rangle , \quad (\text{I-103})$$

où les valeurs moyennes $\langle \hat{Q} \rangle$ et $\langle d\hat{H}(\lambda) \rangle$ sont calculées dans l'état $|\Psi_\lambda\rangle$. Le deuxième terme de $d\tilde{E}(\lambda)$ est la contribution due au fait que le hamiltonien dépend de la solution du principe variationnel contraint, associée à λ . Comme il vient d'être discuté, ce terme contient deux effets : l'un provenant de la dépendance explicite en densité dans l'interaction effective utilisée pour déterminer le champ moyen, l'autre indirecte issue de la variabilité de l'espace de valence dans l'approximation BCS. En toute rigueur, il conviendrait de retrancher à $d\tilde{E}(\lambda)$ la contribution de $\langle d\hat{H}(\lambda) \rangle$ provenant du deuxième effet uniquement. Cependant, devant la difficulté à extraire un tel terme et motivés par le but d'obtenir simplement (tout au moins dans un premier temps) un adoucissement des effets de troncature sur les états intervenant dans l'appariement, nous avons émis l'hypothèse qu'il était raisonnable dans une première approximation de retrancher tout le terme $\langle d\hat{H}(\lambda) \rangle$ à $d\tilde{E}(\lambda)$. La quantité qui en résulte est la variation induite par une petite modification de λ de ce que nous appelons l'énergie corrigée $E(\lambda)$:

$$\delta E(\lambda) \approx d\tilde{E}(\lambda) - \langle d\hat{H}(\lambda) \rangle = \frac{\partial f}{\partial \langle \hat{Q} \rangle} d\langle \hat{Q} \rangle . \quad (\text{I-104})$$

Nous voulons maintenant déduire l'expression de la variation de E entre deux valeurs quelconques de λ (non nécessairement proches). A cet effet, il convient de se rappeler que la fonction de contrainte f dépend de deux variables λ et $\langle \hat{Q} \rangle$. Néanmoins, à l'issue d'un calcul variationnel sous contrainte dans lequel on a choisi λ , on obtient la valeur de $\langle \hat{Q} \rangle$ associée à cette valeur de λ . Autrement dit, le principe variationnel introduit une relation (biunivoque ou non) entre λ et $\langle \hat{Q} \rangle$. En intégrant entre deux solutions λ_0 et λ le long du chemin défini par la relation $\lambda(\langle \hat{Q} \rangle)$, on trouve :

$$E(\lambda) - E(\lambda_0) = \int_{\langle \hat{Q} \rangle_0}^{\langle \hat{Q} \rangle} \frac{\partial f}{\partial \langle \hat{Q} \rangle}(\lambda(Q), Q) dQ \quad (\text{I-105})$$

où $\langle \hat{Q} \rangle_0$ est la valeur de $\langle \hat{Q} \rangle$ associée à λ_0 . L'expression (I-105) ne permettant de calculer que la différence d'énergie corrigée entre deux solutions, seule quantité pertinente physiquement, nous allons fixer par commodité la valeur que prend l'énergie corrigée E en λ_0 :

$$E(\lambda_0) \equiv \tilde{E}(\lambda_0) . \quad (\text{I-106})$$

Appliquons cela à notre étude de la fission. Le mode collectif à considérer est la déformation dans la direction de la fission, c'est-à-dire l'élongation Q_{20} suivant l'axe z . En

choisissant une contrainte quadratique, présentée dans le paragraphe I.3 a, et en prenant le minimum ND comme point de référence, on obtient l'expression suivante pour l'énergie corrigée en fonction de l'élongation Q_{20} :

$$E(Q_{20}) = \tilde{E}_{\text{ND min}} + \int_{Q_{20}^{(\text{ND})}}^{Q_{20}} 2 C_2 (Q - \mu_2(Q)) dQ \quad (\text{I-107})$$

dans laquelle $\tilde{E}_{\text{ND min}}$ est la valeur de \tilde{E} au minimum normalement déformé, d'élongation $Q_{20}^{(\text{ND})}$, et $\mu_2(Q)$ la valeur de la contrainte permettant d'obtenir $\langle \hat{Q}_{20} \rangle = Q$. L'intensité C_2 de la contrainte sur le moment quadripolaire pouvant changer d'un calcul à l'autre, on doit prendre garde à ne pas factoriser l'intégrale ci-dessus par C_2 , sauf bien sûr si l'intensité de la contrainte est constante le long du chemin d'intégration. En pratique, l'intégrand ne pouvant être connu que de façon tabulée, nous l'avons interpolé par une fonction cubique de type spline pour ensuite intégrer cette fonction (de façon exacte puisqu'il s'agit d'une fonction polynômiale de degré 3 définie par morceaux).

CHAPITRE II

Aspects numériques

Dans les premiers calculs Hartree-Fock de la barrière de fission de l'isotope ^{240}Pu [31, 32], les auteurs mettent en lumière un aspect numérique important pour l'obtention de la double bosse caractéristique des noyaux lourds tels que cet isotope : la taille de la base d'expansion des fonctions d'onde doit être suffisante. Un problème semblable se pose pour la décomposition en série de Fourier des fonctions n'ayant pas la symétrie axiale, dont le développement s'avère converger assez vite. Dans ce travail, nous nous sommes aperçus que ce problème en soulevait un autre : celui de la précision des intégrations numériques. Il est crucial pour la capacité de notre approche à décrire des noyaux possédant des formes très allongées. Comme nous allons le voir, une bonne précision numérique conjuguée à une base d'oscillateur harmonique assez grande permet de décrire des configurations di-nucléaires presque aussi bien qu'une base « à deux centres ».

II.1 Effets de troncature de la base d'oscillateur harmonique

Pour résoudre les équations de Hartree-Fock, on décompose les fonctions d'onde individuelles sur la base (infinie mais dénombrable) de l'oscillateur harmonique axialement déformé puis on diagonalise la matrice du hamiltonien de Hartree-Fock dans cette base. Etant infinie, cette base doit évidemment être tronquée dans tout calcul pratique. Comme cela a été proposé dans la référence [79], la prescription de troncature utilise la coupure en énergie suivante, fonction de la déformation :

$$\hbar\omega_{\perp}(n_{\perp} + 1) + \hbar\omega_z \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \leq \hbar\omega_0(N_0 + 2), \quad (\text{II-1})$$

où $\omega_0 = (\omega_z\omega_{\perp}^2)^{1/3}$ et où N_0 est le nombre de couches sphériques. Ce dernier paramètre est relié à la taille de base. Une telle troncature introduit, pour une valeur donnée de N_0 ,

une dépendance non physique des observables calculées dans les paramètres de base b et q définis par :

$$b = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} \quad (\text{II-2})$$

$$q = \frac{\omega_\perp}{\omega_z} . \quad (\text{II-3})$$

Etant donné le caractère variationnel de notre approche, il faut donc fixer ces deux paramètres à leur valeur minimisant l'énergie et ce, en chaque point de la courbe d'énergie de déformation que l'on cherche à obtenir pour un noyau donné.

En outre, le paramètre N_0 , une fois b et q optimisés, introduit une dépendance des énergies relatives (calculées par rapport au minimum local le moins déformé par exemple, puisque l'on s'intéressera aux barrières de fission), et de toute autre quantité physique, avec la taille de la base. Clairement, en augmentant cette dernière on accroît l'ensemble des fonctions d'essai donc l'énergie absolue doit diminuer et à la limite où N_0 est infiniment grand, elle doit converger. Notons que plus N_0 est grand, moins la dépendance en b et q est importante (voir référence [79]). En pratique, nous sommes intéressés par l'énergie de déformation relative. Il suffit donc de s'assurer que les courbes d'énergie correspondant à différentes valeurs de N_0 sont simplement translatées vers le bas quand la taille de la base augmente. En guise d'exemple, nous avons choisi le ^{252}Cf pour procéder à cette investigation. La figure II.1 montre que l'on obtient bien ce que l'on souhaite, à savoir une simple translation des courbes à partir d'une certaine valeur de N_0 . Comme on peut

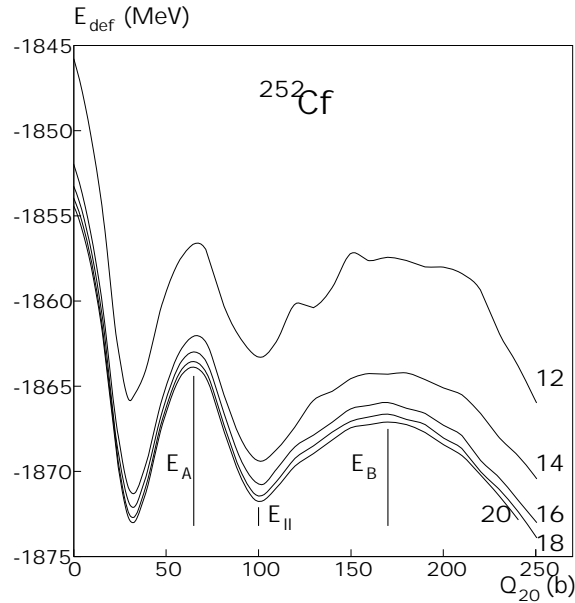


Figure II.1 — Courbes d'énergie de déformation du ^{252}Cf pour différentes valeurs de N_0 dans l'approche $\text{HF}(\text{SkM}^*) + \text{BCS}(G)$. Du haut vers le bas, les courbes correspondent à $N_0 = 12$, $N_0 = 14$, $N_0 = 16$, $N_0 = 18$ et $N_0 = 20$.

également le constater sur le tableau II.1, la convergence a lieu pour des valeurs de N_0 tout à fait accessibles aux ordinateurs actuels, même si les temps de calcul pour $N_0 \geq 18$ deviennent vite prohibitifs lorsque l'on relâche les contraintes de symétrie (axiale, de parité

Tableau II.1 — Hauteurs (en MeV) de la première barrière E_A et de la deuxième E_B , et énergie relative E_{II} de l'état super-déformé par rapport au minimum normalement déformé du ^{252}Cf obtenues avec différentes valeurs de N_0 .

N_0	E_A	E_{II}	E_B
12	10.8	2.5	8.6
14	10.9	1.9	7.1
16	10.1	1.3	6.0
18	10.2	1.3	6.1
20	10.2	1.2	5.9

ou de renversement du temps), d'autant plus que le noyau étudié est lourd. En effet, on peut raisonnablement considérer que la convergence des trois énergies relatives que sont les hauteurs de la première et de la seconde barrières (E_A et E_B respectivement) et l'énergie E_{II} du minimum super-déformé (SD) par rapport au minimum normalement déformé (ND), est atteinte pour $N_0 = 16$ avec une précision d'environ 100 keV.

Dans la suite de ce travail, nous avons effectué tous les calculs avec $N_0 = 16$, exceptée l'optimisation des paramètres de base b et q qui a été réalisée avec $N_0 = 14$ pour des raisons de temps de calcul. Toutefois, il a été vérifié sur deux noyaux (^{236}U et ^{252}Cf) que les hauteurs des barrières obtenues avec $N_0 = 16$ après une optimisation avec $N_0 = 14$ diffèrent d'au plus 0.3 MeV de ce que l'on obtient dans un calcul où l'optimisation puis le calcul final ont été effectués avec $N_0 = 16$ (voir tableau II.3). Il faut noter que des calculs Hartree-Fock-Bogoliubov récents de barrières de fission dans la région du Fermium, utilisant la paramétrisation D1S de la force de Gogny, trouvent aussi des résultats convergés jusqu'au-delà de la deuxième barrière pour une taille de base voisine de $N_0 = 16$ [37].

Le problème de l'optimisation de la base se pose bien sûr aussi dans le cas où l'on considère des solutions non axialement symétriques (où en principe il y a trois paramètres de base à considérer) ou non symétriques de réflexion, avec des temps de calcul beaucoup plus longs que dans le cas symétrique discuté ci-dessus. Comme la solution triaxiale d'énergie la plus basse à une élongation fixée correspond à une valeur de γ (dont on peut trouver la définition dans la référence [91] par exemple) assez faible en général ($\gamma \leq 15^\circ$), elle est relativement proche de la solution axiale allongée (prolate) à la même élongation. Par conséquent, pour une valeur de Q_{20} donnée, nous avons supposé que les paramètres de base b et q optimisés dans un calcul triaxial étaient voisins de ceux obtenus par optimisation dans un calcul axial à cette même élongation et avons effectué tous nos calculs non axiaux avec les valeurs de b et q retenues dans le cas axial allongé. Nous avons adopté la même ligne de conduite pour les solutions asymétriques de réflexion. En effet, les valeurs de Q_{30} minimisant l'énergie à chaque valeur de Q_{20} le long de la courbe de déformation jusqu'au sommet de la deuxième barrière étant assez faibles (inférieures à 10 barns^{3/2} environ pour le ^{252}Cf comme on le verra dans le chapitre III), on peut considérer que les solutions asymétriques de réflexion ainsi obtenues sont assez voisines de celles symétriques à la même élongation. Par conséquent, cette dernière étant fixée, on utilise pour tout calcul non symétrique les valeurs de b et q optimisées dans un calcul symétrique (axial et de

réflexion) à cette déformation. Afin de valider cette approximation, nous avons effectué quelques optimisations explicitement dans des cas non symétriques, avec $N_0 = 16$ et pour deux noyaux différents (^{236}U et ^{252}Cf). Plus précisément, nous effectués une optimisation complètement triaxiale au voisinage du sommet de la première barrière et une optimisation complètement asymétrique de réflexion près du sommet de la seconde barrière de fission. Dans chacun des deux cas, il a fallu trouver une valeur adaptée de la contrainte sur Q_{20} de façon à nous situer au point souhaité. Nous avons effectué également une optimisation totalement symétrique en ces deux points avec les mêmes contraintes quadrupôlaires que celles pour les optimisations non symétriques. Les résultats obtenus sont rassemblés dans le tableau II.2, dans lequel on peut constater en premier lieu que les déformations trouvées dans les cas non symétriques (triaxial ou asymétrique de réflexion) diffèrent au plus de 0.5 b de celles trouvées dans le cas symétrique. Par ailleurs, les paramètres optimaux dans les deux cas sont en général égaux à mieux que 10^{-2} près pour b et 10^{-1} pour q , excepté pour le point à 145 b dans l' ^{236}U . Mais dans tous les cas les énergies relatives résultant d'une optimisation non symétrique diffèrent d'au plus 0.25 MeV de celles obtenues à la suite d'une optimisation symétrique, ce qui justifie la ligne de conduite mentionnée plus haut.

Tableau II.2 — *Energies relatives non symétriques $E_{\text{n.s.}}^*$ (en MeV) calculées dans l'approximation $HF(\text{SkM}^*) + \text{BCS}(G)$ par rapport au minimum ND, évaluées dans différents processus d'optimisation (sans correction rotationnelle). Les première et troisième lignes correspondent à des optimisations des paramètres effectuées sur des solutions axiales et symétriques de réflexion, tandis que la seconde et la quatrième correspondent à des solutions respectivement triaxiales symétriques de réflexion et axiales asymétriques de réflexion. Les valeurs optimales de b (en fm^{-1}) et de q (sans dimension) ainsi que l'élongation Q_{20} (en barns) sont également indiquées.*

Type d'opt.	^{236}U				^{252}Cf			
	b_{opt}	q_{opt}	Q_{20}	$E_{\text{n.s.}}^*$	b_{opt}	q_{opt}	Q_{20}	$E_{\text{n.s.}}^*$
opt. ax.	0.46	1.3	54.4	7.415	0.46	1.4	65.4	8.344
opt. triax.	0.46	1.3	54.4	7.415	0.46	1.4	65.4	8.344
opt. sym.	0.45	2.0	145	5.611	0.42	2.0	155	3.560
opt. asym.	0.42	1.7	145	5.360	0.43	2.0	155	3.518

Pour vérifier tout cela sur les hauteurs des barrières de fission E_A et E_B , nous avons utilisé les paramètres de base du tableau II.2 car ils sont issus d'optimisations à des déformations voisines des sommets des barrières. Sur le tableau II.3, on peut constater que le processus d'optimisation a peu d'influence sur E_A et E_B .

Tableau II.3 — Hauteurs de barrières de fission $HF(SkM^*)+BCS(G)$ évaluées dans le cadre de processus différents d’optimisation de la base utilisant deux valeurs distinctes de N_0 , sans correction rotationnelle, dans deux noyaux (^{236}U et ^{252}Cf).

Noyau	N_0	E_A		E_B	
		axial	triaxial	symétrique	asymétrique
^{236}U	14	7.9	7.6	12.6	6.5
	16	7.7	7.5	12.5	6.3
^{252}Cf	14	10.1	8.1	6.0	5.0
	16	9.8	8.3	6.2	5.2

II.2 Effets de troncature de la décomposition de Fourier

Dans un calcul triaxial, comme on l’a vu dans la section I.3 b du chapitre I, les fonctions d’onde dépendant de la variable angulaire θ (angle autour de l’axe z de symétrie de la base d’oscillateur harmonique axial) sont décomposées en séries de Fourier. Même pour des formes triaxiales, ces décompositions contiennent un nombre fini de termes en pratique (les composantes d’ordres les plus élevés deviennent négligeables), autrement dit on observe une convergence assez rapide des quantités physiques d’intérêt (énergie, moment quadropolaire triaxial Q_{22}) avec le nombre maximal de composantes N_F [81]. Nous avons vérifié cela sur le ^{252}Cf au sommet de la première barrière de fission, où l’instabilité triaxiale est maximale comme on le verra dans le chapitre III sur les résultats des calculs de barrières de fission $HF+BCS$. Le tableau II.4 présente la hauteur de la première barrière en MeV, arrondies au keV, ainsi que la valeur de Q_{22} pour différents nombres maximaux de composantes de Fourier. On constate que, pour $N_F = 7$, ces deux quantités physiques ont convergé, ce

Tableau II.4 — Hauteur de la première barrière de fission (en MeV) du ^{252}Cf (sans correction rotationnelle) obtenues avec différentes valeurs de N_F et valeurs de Q_{22} correspondantes.

N_F	$Q_{22}(\text{fm}^2)$	E_A
3	455	9.333
5	583	8.027
7	573	8.062
9	573	8.062
11	573	8.062

qui prouve bien que l’on peut retenir seulement les premiers termes de la décomposition

de Fourier pour notre étude.

II.3 Intégration numérique

Au cours de la résolution des équations de Hartree-Fock de manière itérative, il est nécessaire de calculer des intégrales sur tout l'espace, notamment pour exprimer les éléments de matrice du hamiltonien de Hartree-Fock dans la base de l'oscillateur harmonique et pour calculer le potentiel coulombien direct. Etant donné la structure de l'interaction de Skyrme, la valeur moyenne du hamiltonien effectif dans un déterminant de Slater prend la forme de l'intégrale d'une densité hamiltonienne sur tout l'espace. Enfin, tous les moments de la densité nucléonique $\rho(\mathbf{r})$ s'expriment comme valeurs moyennes d'opérateurs dans le déterminant de Slater solution des équations de Hartree-Fock, donc sous forme d'une intégrale sur tout l'espace. Toutes ces intégrales sont effectuées par une méthode numérique du type quadrature de Gauss, prenant la forme, à deux dimensions :

$$\int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} f(x, y) w_x(x) w_y(y) dx dy = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} W_x^i W_y^j f(x_i, y_j) \quad (\text{II-4})$$

où \mathcal{X} et \mathcal{Y} sont les domaines d'intégration, w_x et w_y les fonctions de poids associées à chaque variable, N_x et N_y les nombres de points de Gauss (ou degrés des méthodes suivants x et y), W_x^i et W_y^j les $i^{\text{ème}}$ et $j^{\text{ème}}$ poids de Gauss suivant x et y respectivement, et x_i, y_j les racines des polynômes orthogonaux associés aux fonctions de poids et aux domaines d'intégration (leur construction est présentée dans la section II.4). Même dans les calculs triaxiaux, nous utilisons une base à symétrie axiale, donc il y a en général uniquement deux variables d'intégration à considérer, l'intégration sur la troisième dimension s'effectuant dans ce cas analytiquement à partir de la décomposition de Fourier des densités et potentiels considérés. Ces deux variables d'intégration sont d'une part la coordonnée réduite suivant l'axe de symétrie, $\xi = \beta_z z$ où $\beta_z = \sqrt{m\omega_z/\hbar}$, d'autre part le carré de la coordonnée radiale réduite, $\eta = \beta_{\perp}^2 r^2$ avec $\beta_{\perp} = \sqrt{m\omega_{\perp}/\hbar}$. Seules les intégrales elliptiques intervenant dans le calcul du champ coulombien direct triaxial nécessitent une intégration numérique sur l'angle θ autour de l'axe z (voir l'annexe F). Nous avons donc utilisé trois quadratures différentes pour calculer les divers types d'intégrales ci-dessus :

- le long de l'axe de symétrie z des états de base, la méthode de Gauss-Hermite à $N_G^{(z)}$ points, se réduisant à la moitié pour les intégrands symétriques de réflexion par rapport au plan (xOy) ;
- dans la direction radiale (perpendiculaire à z), la méthode de Gauss-Laguerre à $N_G^{(r)}$ points ;
- autour de l'axe z , une méthode de Gauss-Legendre à $N_G^{(\theta)}$ points pour les intégrales sur l'angle θ qui ne peuvent pas être effectuées par décomposition en série de Fourier (il s'agit seulement des intégrales elliptiques).

Comme on vient de le voir, l'intégration numérique est une étape clef non seulement dans la résolution des équations de Hartree-Fock, mais aussi dans le calcul des quantités physiques. Tout comme la troncature de la base qui introduit une dépendance dans sa taille et ses paramètres, la non exactitude des intégrations introduit une dépendance non physique dans les degrés $N_G^{(z)}$, $N_G^{(r)}$ et $N_G^{(\theta)}$ des méthodes de Gauss employées. A la limite où ces degrés sont infiniment grands, et en supposant que les quantités requises pour les quadratures sont connues avec assez de précision, on obtient les résultats exacts. Il est

donc important de s'assurer que nos résultats (surtout l'énergie relative) convergent bien avec $N_G^{(z)}$, $N_G^{(r)}$ et $N_G^{(\theta)}$.

En fait, ce problème peut être relié à celui de la taille de la base. En effet, puisque nous nous intéressons à de très grandes déformations, c'est-à-dire bien au-delà du second point-selle, il faut faire intervenir des fonctions de base ayant un nombre important n_z de nœuds sur l'axe de fission pour pouvoir décomposer les fonctions d'onde individuelles (dont la borne supérieure du support atteint des valeurs de z très élevées). Compte tenu de la prescription de troncature (II-1), cela nécessite une grande taille de base N_0 . La conséquence immédiate des valeurs élevées de n_z est la nécessité d'un très grand nombre de points de Gauss $N_G^{(z)}$ pour les intégrations sur z . Nous avons alors cherché une relation approximative entre la valeur maximale de n_z , notée $(n_z)_{\max}$, et le degré minimum $(N_G^{(z)})_{\min}$ de la méthode de Gauss suivant z pour avoir des énergies relatives raisonnablement convergées. Il se trouve que $(n_z)_{\max}$ et $(N_G^{(z)})_{\min}$ vérifient empiriquement la relation approchée suivante :

$$(n_z)_{\max} = q^{2/3}(N_0 + 2) - q - \frac{1}{2} \approx \frac{(N_G^{(z)})_{\min}}{1.5}. \quad (\text{II-5})$$

Cette relation sert à trouver une valeur de départ de $N_G^{(z)}$ pour étudier la convergence de l'énergie relative avec ce paramètre. Nous avons trouvé de façon également empirique une relation approchée similaire pour $N_G^{(r)}$:

$$(n_r)_{\max} = q^{-1/3} \left(\frac{N_0}{2} + 1 - \frac{1}{4} q^{-2/3} \right) - \frac{1}{2} \approx \frac{(N_G^{(r)})_{\min}}{1.5}. \quad (\text{II-6})$$

Prenant le cas du ^{252}Cf comme exemple, nous avons obtenu la convergence des hauteurs de barrières de fission E_A et E_B , correspondant à des déformations différentes par conséquent, pour $N_G^{(z)} = 50$ et $N_G^{(r)} = 16$, comme le montre le tableau II.5.

Il reste le cas des intégrales elliptiques effectuées par la méthode de Gauss-Legendre. Par une étude similaire et par comparaison avec les résultats obtenus avec un logiciel de calcul formel (ce sont des intégrales s'exprimant à l'aide de fonctions hypergéométriques, tabulées), nous avons pu nous assurer que $N_G^{(\theta)} = 50$ était un nombre de points de Gauss raisonnablement satisfaisant.

II.4 Base à deux centres

Le but final de ce travail étant le calcul du spin des fragments de fission, il est nécessaire de pouvoir décrire convenablement des configurations dans lesquelles les fragments primaires sont plus ou moins bien séparés. Autrement dit, cela implique une étude à des déformations bien supérieures à celle du sommet de la deuxième barrière de fission. Pour cela, on peut penser qu'une base de fonctions d'onde plus adaptée que la base traditionnelle d'oscillateur harmonique axial « à un centre », est une base dite « à deux centres », constituée de fonctions d'onde dont le support est la réunion de deux régions séparées de l'espace correspondant globalement aux deux fragments. Nous avons donc mis au point un code HF+BCS axial et asymétrique de réflexion utilisant une base de fonctions d'onde de la forme de celles construites par H. Flocard [92] :

$$\varphi_\alpha(\mathbf{r}, \sigma, q) = \chi_q \chi_\Sigma \Psi_{n_z}(z) \Psi_{n_r}^\Lambda(r) \frac{e^{i\Lambda\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{II-7})$$

Tableau II.5 — *Hauteurs de la première barrière E_A et de la deuxième barrière E_B de fission du ^{252}Cf calculées en MeV avec $N_0 = 16$ et différents nombre de points de Gauss $N_G^{(z)}$ et $N_G^{(r)}$.*

$N_G^{(z)}$	$N_G^{(r)}$	E_A	E_B
22	10	10.91	—
30	10	11.07	8.50
40	10	11.02	8.89
50	10	11.02	8.84
50	12	9.44	7.74
50	14	10.23	8.22
50	16	9.93	8.11
50	18	9.96	8.12
50	20	9.96	8.12

similaires à celles de l'oscillateur harmonique axialement déformé (voir par exemple [30]), à ceci près que, suivant z , la fonction d'onde de base $\Psi_{n_z}(z)$ est définie par :

$$\Psi_{n_z}(z) = \sqrt{\beta_z} \sqrt{G_{\xi_0}(\xi)} P_{n_z}(\xi) \quad (\text{II-8})$$

avec $\xi_{(0)} = \beta_z z_{(0)}$ et $\beta_z = \sqrt{\frac{m\omega_z}{\hbar}}$. La fonction P_{n_z} est le polynôme normé de degré n_z appartenant à la famille de polynômes orthogonaux associée à la fonction de poids G_{ξ_0} sur l'intervalle $]-\infty, +\infty[$:

$$G_{\xi_0}(\xi) = f(\xi_0) \left(e^{-(\xi-\xi_0)^2} + e^{-(\xi+\xi_0)^2} \right), \quad (\text{II-9})$$

avec

$$f(\xi_0) = \frac{\xi_0^2 + \frac{1}{2}}{\xi_0^2 + 1}. \quad (\text{II-10})$$

La fonction d'onde $\Psi_{n_z}(z)$ est adaptée à la description de noyaux en forme de « cacahuète », lors de la fission ou de la fusion binaire. De plus, elle peut se ramener au cas déjà étudié de l'oscillateur harmonique axial si $z_0 = 0$. Dans ce cas, la fonction de poids est une gaussienne et les polynômes orthogonaux correspondants sont les polynômes d'Hermite. Sur la figure II.2, on a représenté la fonction de poids $G_{\xi_0}(\xi)$ pour trois valeurs du paramètre ξ_0 . Notons que la distance entre les centres des deux gaussiennes vaut $2\xi_0$.

La construction des polynômes orthogonaux associés à cette fonction de poids et la détermination de leurs racines sont décrites dans les deux appendices de ce chapitre.

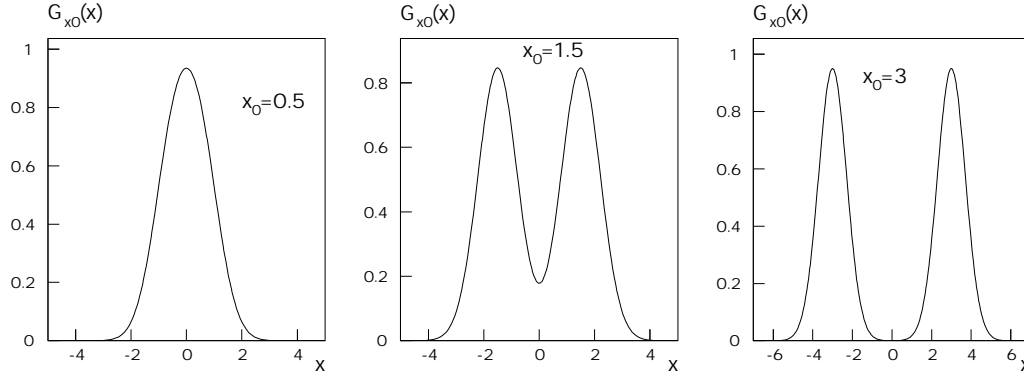


Figure II.2 — Courbes de variation de la fonction de poids G_{ξ_0} en fonction de ξ pour trois valeurs du paramètres ξ_0 .

II.5 Comparaison des résultats de calculs avec les deux bases

Afin de tester la pertinence de la base de l'oscillateur harmonique axiale (tronquée) dans l'étude de l'énergie de déformation relative (c'est-à-dire en pratique par rapport au minimum local le moins déformé) pour de grandes valeurs de Q_{20} , nous avons comparé les résultats des calculs utilisant cette base aux résultats obtenus avec la base à 2 centres développée dans la section II.4. En effet, il est naturel de penser que, pour une taille de base N_0 fixée, la base à 2 centres est plus adaptée à la description de configurations dans lesquelles on commence à discerner des pré-fragments à mesure que l'on augmente l'élongation du noyau fissionnant, et surtout dans des configurations correspondant à deux fragments séparés par une distance assez grande devant leur rayon moyen.

En guise d'exemple, nous avons effectué cette étude comparative sur un noyau pair-pair léger, en choisissant l'isotope ^{32}S du Soufre puisqu'il a déjà fait l'objet de calculs avec la base à 2 centres par H. Flocard [92]. Nous nous sommes donc placés dans les mêmes conditions de calculs en nous limitant à des solutions possédant les symétries de révolution et de réflexion et sans inclure la correction rotationnelle. Comme dans la référence [92], nous n'avons pas tenu compte de la correction de l'énergie cinétique du centre de masse, car la validité de l'approximation (I-34) est remise en cause lorsque l'on a affaire à un système formé de deux fragments séparés. Sur le plan numérique, la taille de base retenue est $N_0 = 8$ et avons effectué toutes les intégrations avec $N_G^{(z)} = 50$ et $N_G^{(r)} = 16$. Par ailleurs, nous avons vu que la base à 2 centres fait intervenir un paramètre supplémentaire par rapport à la base de l'oscillateur harmonique : la demi-distance z_0 entre les deux maxima de la fonction de poids G_{ξ_0} (avec $\xi_0 = \beta_z z_0$). En toute rigueur, il conviendrait d'optimiser les trois paramètres b , q et z_0 pour une élongation fixée afin d'obtenir la solution la plus basse en énergie, comme cela a été fait dans la référence [92]. En fait, ce que nous avons réalisé est une étude (encore au stade exploratoire) de l'influence de q et z_0 sur l'énergie E en un point de la courbe $E(Q_{20})$ représentée sur la partie supérieure de la figure II.3. Pour cela, nous avons d'abord optimisé la base dans l'état fondamental et ensuite utilisé la valeur trouvée de b pour notre étude à grande déformation. Or le fondamental du ^{32}S a une faible élongation $Q_{20} \approx 76 \text{ fm}^2$, donc il est quasiment sphérique (en supposant que les autres moments multipôlares sont également faibles, ce qui a été vérifié pour Q_{40}) et

par suite les valeurs optimales de q et z_0 en ce point sont $q = 1$ et $z_0 = 0$ quelle que soit celle du paramètre b . Il ne reste alors qu'à optimiser ce dernier. Le résultat ainsi obtenu est $b = 0.54 \text{ fm}^{-1}$.

Puisque nous désirons tester la capacité de la base de l'oscillateur harmonique à décrire des configurations de fusion, c'est-à-dire correspondant à deux fragments éloignés, et de la comparer aux calculs employant la base à 2 centres, nous avons retenu un point à la fois d'élongation Q_{20} assez grande et apparaissant sur la courbe d'énergie de déformation de H. Flocard : celui correspondant à $Q_{20} = 50.0 \text{ b}$, d'énergie $E \approx -218 \text{ MeV}$. En ce

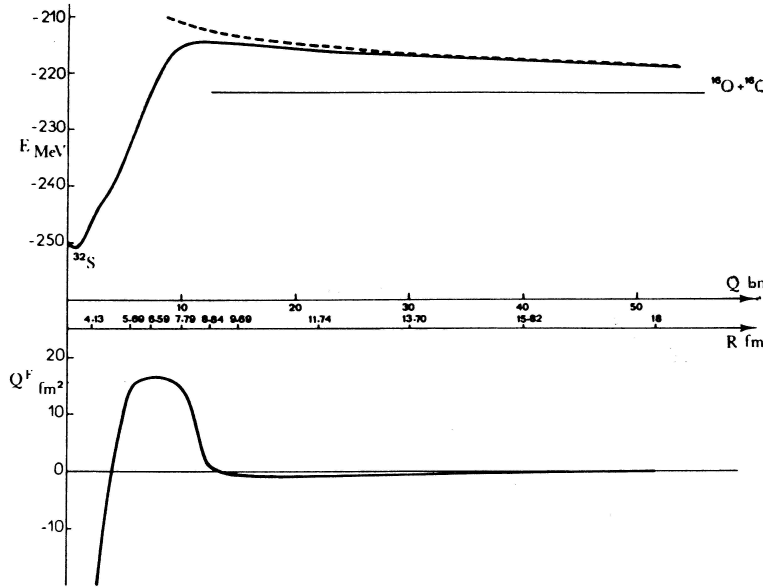


Figure II.3 — *Partie supérieure : courbes d'énergie de déformation (trait plein) du ^{32}S et d'énergie coulombienne (tirets) entre deux noyaux $d^{16}\text{O}$ en fonction du moment quadrupolaire de masse en barns. Une échelle en terme de distance R entre les centres de masse est donnée sous l'axe de Q . Partie inférieure : Variation du moment quadrupolaire des fragments le long du chemin de déformation. Reproduction de la figure 1 de la référence [92].*

point, la densité de nucléons dans un plan méridien (contenant la direction de fission z) est représentée sous forme de lignes de niveau sur la figure II.4 (partie supérieure). Etant donné la symétrie de réflexion imposée à nos solutions, nous obtenons une configuration correspondant à deux noyaux ^{16}O . Leurs centres de masse sont distants de $D = 17.68 \text{ fm}$ et leur moment quadrupolaire vaut $Q_{20}^{(f)} = 7 \text{ fm}^2$: ils sont donc quasiment sphériques (cela se voit sur les contours d'isodensité de la figure II.4), par conséquent très proches de leur état fondamental. Les valeurs de E obtenues avec cette valeur de b à $Q_{20} = 50.0 \text{ b}$ pour différentes valeurs de q et de z_0 sont reportées dans le tableau II.6. On constate l'existence de deux minima locaux dans la surface d'énergie $E(q, z_0)$, quasiment dégénérés, l'un pour $(q \approx 2.5, z_0 \approx 6.0 \text{ fm})$, l'autre pour $(q \approx 1.7, z_0 \approx 9.0 \text{ fm})$, séparés par un col à environ 1 MeV au-dessus (point à $q \approx 1.5$ et $z_0 \approx 8.0 \text{ fm}$). Il est intéressant de constater que la valeur de z_0 dans la deuxième solution est quasiment égale à la moitié de la distance entre les centres de masse des fragments : $z_0 \approx 9.0 \text{ fm} \approx D/2$. Cela est en fait conforme à l'idée que la fonction de poids indique où la densité de probabilité associée à

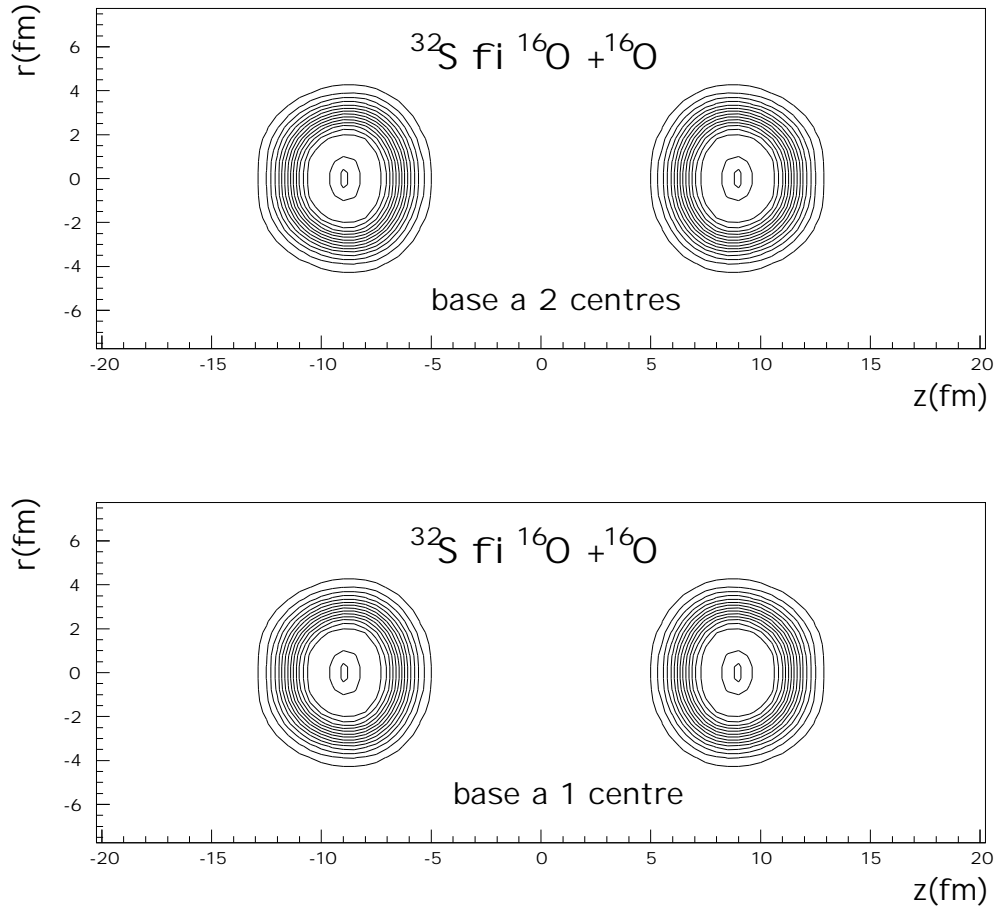


Figure II.4 — Contours d'isodensité dans un plan méridien (contenant la direction de fission z) associés à une configuration du ^{32}S correspondant à deux noyaux d' ^{16}O dont les centres de masse sont distants de $D = 17.68 \text{ fm}$. La partie supérieure correspond à un calcul utilisant la base à 2 centres avec les paramètres $b = 0.54 \text{ fm}^{-1}$, $q = 1.7$ et $z_0 = D/2 = 8.84 \text{ fm}$, tandis que la partie inférieure est issue d'un calcul avec la base de l'oscillateur harmonique et le jeu de paramètres $b = 0.54 \text{ fm}^{-1}$, $q = 3.5$.

chaque fonction d'onde individuelle est préférentiellement concentrée. La base à 2 centres sera donc d'autant plus adaptée que les deux gaussiennes de la fonction de poids seront centrées en des points proches des centres de masse des fragments. En revanche la première solution semble de nature numérique uniquement et non physique ; il est probable qu'elle disparaisse en augmentant la taille de la base.

Ensuite, nous avons calculé l'énergie de déformation à la même déformation en utilisant la base de l'oscillateur harmonique avec la même valeur de b que précédemment pour différentes valeurs de q . Les résultats obtenus pour E sont présentés dans le tableau II.7.

Comme nous travaillons avec $N_0 = 8$ ici, les valeurs retenues $N_G^{(z)} = 50$ et $N_G^{(r)} = 16$

Tableau II.6 — *Energie totale déformation (en MeV) du ^{32}S à $Q_{20} = 50$ b calculée pour différentes valeurs de q et z_0 avec la base à 2 centres et la force de Skyrme SIII comme dans la référence [92], dans le cas axial et symétrique de réflexion sans correction rotationnelle ni du centre masse. La valeur du paramètre b est 0.54 fm^{-1} et les degrés des méthodes d'intégration de Gauss valent $N_G^{(z)} = 24$ et $N_G^{(r)} = 12$.*

$q \backslash z_0(\text{fm})$	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0	9.0	10.0
1.0	>-146	>-147	-211.562	-219.258	-219.576	-219.302	-209.093
1.5	-217.497	-219.123	-219.234	-219.696	-219.075	-220.060	-218.860
2.0	-219.019	-219.248	-219.135	-219.676	-218.869	-219.852	-218.564
2.5	-218.370	-218.188	-220.126	-218.574	-219.752	-219.141	-218.457
3.0	-217.860	-218.952	-219.665	-218.222	-219.736	-218.868	-217.814
3.5	-216.795	-218.620	-218.039	-218.278	-218.854	-219.748	-216.144
4.0				-216.033		-218.603	

Tableau II.7 — *Energie de déformation du ^{32}S calculée à $Q_{20} = 50$ b pour différentes valeurs de q avec la base de l'oscillateur harmonique dans les conditions du tableau II.6, exceptés les degrés des méthodes d'intégration qui valent ici $N_G^{(z)} = 50$ et $N_G^{(r)} = 16$.*

q	$E(\text{MeV})$
2.5	-210.300
3.0	-215.538
3.5	-215.852
4.0	-215.040
4.5	-213.546
5.0	-211.516
5.5	-209.884
6.0	-207.495

deviennent nécessaires dès que $q \gtrsim 3$ (voir l'expression (II-5) de $(N_G^{(z)})_{\min}$), alors qu'au fondamental $N_G^{(z)} = 20$ suffirait largement. On remarque que les valeurs de E trouvées sont toutes supérieures à celles obtenues avec la base à 2 centres quelles soient les valeurs de z_0 et de $q \geq 1.5$. Cependant, elles restent tout à fait raisonnables, d'autant plus que la densité de nucléons associée à la solution d'énergie minimale (pour $q \approx 3.5$), représentée sur la partie inférieure de la figure II.4, est très semblable à celle issue des calculs avec

une base à 2 centres (partie supérieure de la même figure). Par conséquent, la base de l'oscillateur harmonique est apte à décrire des formes très éloignées de la configuration fondamentale au prix d'un effort numérique en ce qui concerne la précision des intégrations numériques. Néanmoins, la base à 2 centres, fournissant une solution variationnelle d'énergie plus basse au point étudié ($Q_{20} = 50$ b), donc une énergie relative plus basse par rapport au fondamental, est mieux adaptée que la base de l'oscillateur harmonique.

Pour finir cette section dédiée à la base à 2 centres, il est intéressant de remarquer que la méthode de construction de cette base présentée ici est tout à fait générale. Nous l'avons d'ailleurs employée dans l'étude de systèmes d'agrégats de carbone pour construire des bases adaptées chacune à la forme particulière du système considéré. On peut citer ici notre travail sur les bases associées à des fonctions de poids à n centres alignés ($n \geq 3$) servant à étudier les chaînes de carbone courtes, celles associées à des fonctions de poids en forme de tore pour l'étude d'anneaux de carbones et celles à couronne sphérique pour l'agrégat C_{60} (« fullérène ») [93]. En guise d'exemple, nous avons représenté sur la figure II.5 le carré de deux fonctions d'ondes Ψ_{n_z} d'une base à 3 centres.

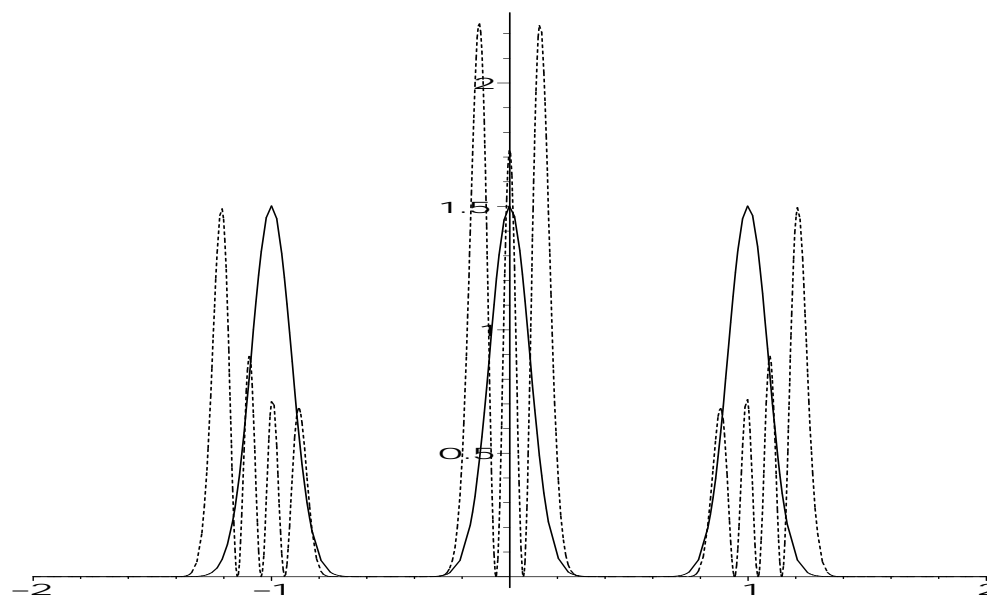


Figure II.5 — Carré des fonctions d'onde Ψ_{n_z} (à une constante multiplicative près) d'une base à 3 centres avec $n_z = 0$ (trait plein) et $n_z = 10$ (pointillés). La fonction d'onde à $n_z = 0$ est proportionnelle à la fonction de poids (somme de 3 gaussiennes).

Appendice II.A Construction des polynômes orthogonaux $P_n(\xi)$

Comme toute famille de polynômes orthogonaux, celle des $P_n(\xi)$ vérifie une relation de récurrence de la forme :

$$\frac{P_{n+1}(\xi)}{a_{n+1}} = (\xi - \langle P_n | \xi P_n \rangle) \frac{P_n(\xi)}{a_n} - \frac{a_{n-1}}{(a_n)^2} P_{n-1}(\xi) \quad (\text{II-11})$$

où a_k est le coefficient dominant du polynôme $P_k(\xi)$ et où $\langle f | g \rangle$ désigne le produit scalaire des fonctions f et g :

$$\langle f | g \rangle = \int_{\mathcal{X}} G(x) f(x) g(x) dx. \quad (\text{II-12})$$

Dans la définition (II-12), $G(x)$ est une fonction de poids et \mathcal{X} l'intervalle associé. Lorsque la fonction de poids est paire, les P_ℓ ont une parité bien définie $(-1)^\ell$, donc $\langle P_n | \xi P_n \rangle = 0$. C'est le cas de celle considérée dans la présente étude. Grâce à cette relation et aux expressions de P_0 et P_1 , on calcule par récurrence les coefficients $\tilde{\alpha}_{n+1,k}$ du polynôme Q_{n+1} de degré $n+1$ dont le coefficient dominant vaut 1. Pour tout $n \geq 2$, on obtient :

$$\begin{aligned} P_{n+1}(\xi) &= \alpha_{n+1,n+1} \left[\xi^{n+1} + \frac{\alpha_{n,n-1}}{\alpha_{n,n}} \xi^n \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=1}^{n-1} \left(\alpha_{n,k-1} - \frac{\alpha_{n-1,n-1} \alpha_{n-1,k}}{\alpha_{n,n}} \right) \frac{\xi^k}{\alpha_{n,n}} - \frac{\alpha_{n-1,n-1} \alpha_{n-1,0}}{(\alpha_{n,n})^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{II-13})$$

c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_{n+1,n+1} &= 1 \\ \tilde{\alpha}_{n+1,n} &= \frac{\alpha_{n,n-1}}{\alpha_{n,n}} \\ \tilde{\alpha}_{n+1,k} &= \frac{1}{\alpha_{n,n}} \left(\alpha_{n,k-1} - \frac{\alpha_{n-1,n-1} \alpha_{n-1,k}}{\alpha_{n,n}} \right) \quad 1 \leq k \leq n-1 \\ \tilde{\alpha}_{n+1,0} &= -\frac{\alpha_{n-1,n-1}}{(\alpha_{n,n})^2} \alpha_{n-1,0} \end{aligned} \quad (\text{II-14})$$

avec :

$$\tilde{\alpha}_{n,k} \equiv \frac{\alpha_{n,k}}{\alpha_{n,n}} \quad (\text{II-15})$$

et

$$\alpha_{n,n} = a_n. \quad (\text{II-16})$$

On en déduit que $\alpha_{n,k} = 0$ si $(-1)^n \neq (-1)^k$. Ensuite, le coefficient dominant de $P_{n+1}(\xi)$ peut être calculé à partir de la norme de $Q_{n+1}(\xi)$ et de celle de P_{n+1} :

$$a_{n+1} = \frac{\|P_{n+1}\|}{\|Q_{n+1}\|} = \frac{1}{\|Q_{n+1}\|}, \quad Q_{n+1}(\xi) \equiv \sum_{k=0}^{n+1} \tilde{\alpha}_{n+1,k} \xi^k \quad (\text{II-17})$$

car P_{n+1} est normé à 1. Pour la fonction de poids (II-9), le calcul de $\|Q_{n+1}\|$ se ramène à celui de :

$$c_p(\xi_0) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} G_{\xi_0}(\xi) \xi^p d\xi = \delta_{p, \text{pair}} c_0(\xi_0) \left(\xi_0^p + p! \sum_{k=1}^{\frac{p}{2}} \frac{\xi_0^{p-2k}}{2^{2k} k! (p-2k)!} \right) \quad (\text{II-18})$$

avec $c_0(\xi_0) \equiv \frac{1}{p_0^2} = 2\sqrt{\pi} f(\xi_0)$. Le coefficient dominant du polynôme de degré n a pour expression :

$$a_n = p_0 \left[(\tilde{\alpha}_{n0})^2 + \sum_{j=1}^n \left(\frac{c_{2j}(\xi_0)}{c_0(\xi_0)} \sum_{k=\max\{2j-n,0\}}^{\min\{2j,n\}} \tilde{\alpha}_{nk} \tilde{\alpha}_{n2j-k} \right) \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{II-19})$$

car $\tilde{\alpha}_{nq} = 0$ pour tout $q > n$.

Par exemple, les 5 premiers polynômes s'écrivent explicitement :

$$P_0(\xi) = p_0 \quad (\text{II-20})$$

$$P_1(\xi) = p_0 \frac{\xi}{\sqrt{\xi_0^2 + \frac{1}{2}}} \quad (\text{II-21})$$

$$P_2(\xi) = p_0 \frac{\xi^2 - (\xi_0^2 + \frac{1}{2})}{\sqrt{2\xi_0^2 + \frac{1}{2}}} \quad (\text{II-22})$$

$$P_3(\xi) = p_0 \xi \frac{2\xi^2(2\xi_0^2 + 1) - (4\xi_0^4 + 12\xi_0^2 + 3)}{\sqrt{(2\xi_0^2 + 1)(16\xi_0^6 + 36\xi_0^4 + 24\xi_0^2 + 3)}} \quad (\text{II-23})$$

$$P_4(\xi) = \frac{p_0}{\sqrt{8}} \frac{4\xi^4(4\xi_0^2 + 1) - 4\xi^2(8\xi_0^4 + 18\xi_0^2 + 3) + (16\xi_0^6 + 36\xi_0^4 + 24\xi_0^2 + 3)}{\sqrt{(4\xi_0^2 + 1)(64\xi_0^6 + 96\xi_0^4 + 36\xi_0^2 + 3)}} \quad (\text{II-24})$$

Appendice II.B Détermination des racines d'un polynôme de parité bien définie

Pour déterminer les racines positives ou nulles des polynômes $P_n(\xi)$, on utilise la méthode de Graeffe (voir par exemple [94]). Comme cette méthode n'est valable que dans les cas où les valeurs absolues des racines sont distinctes et compte tenu de la parité bien définie des polynômes étudiés, on l'utilise pour trouver non pas les racines de $P_n(\xi)$, mais leurs carrés, c'est-à-dire celles de $p_{E(\frac{n}{2})}(\xi)$ défini par :

$$p_{E(\frac{n}{2})}(\xi) = \begin{cases} p_{\frac{n}{2}}(\xi) = \sum_{k=0}^{\frac{n}{2}} \alpha_{n-2k} \xi^k & \text{si } n \text{ est pair ;} \\ p_{\frac{n-1}{2}}(\xi) = \xi \sum_{k=0}^{\frac{n-1}{2}} \alpha_{n-2k+1} \xi^k & \text{si } n \text{ est impair .} \end{cases} \quad (\text{II-25})$$

On forme une suite de polynômes dont les racines constituent des suites géométriques dont les raisons sont les racines du polynôme initial p_ℓ (avec $\ell = E(n/2)$) :

$$f_p(y) = \sum_{k=0}^{\ell} b_k^{(p)} y^k \quad (\text{II-26})$$

avec :

$$b_k^{(p)} = (-1)^\ell \sum_{j=\max\{2k-\ell, 0\}}^{\min\{2k, \ell\}} (-1)^j b_j^{(p-1)} b_{2k-j}^{(p-1)} \quad (\text{II-27})$$

et

$$y = (\xi^2)^p = x^p . \quad (\text{II-28})$$

On montre alors que les racines x_i de p_ℓ sont, par ordre croissant, approchées par :

$$x_i = \xi_i^2 \approx \left| \frac{b_{i-1}^{(p)}}{b_i^{(p)}} \right|^{(\frac{1}{2})^p} \quad 1 \leq i \leq \ell . \quad (\text{II-29})$$

CHAPITRE III

Résultats des calculs HF+BCS de barrières de fission¹

Le but de cette thèse étant l'étude du spin des fragments au voisinage de la scission, nous sommes amenés à considérer de très grandes déformations que nous souhaitons traiter à l'aide de notre approche microscopique de champ moyen Skyrme-Hartree-Fock+BCS. Aussi, avant de procéder à une telle étude, nous voulons tester la validité de cette approche pour des déformations moins grandes. En ce sens, le calcul de barrières de fission constitue un moyen tout à fait naturel de mettre en œuvre une telle vérification puisque le franchissement de barrières de fission précède la descente vers la scission dans le processus de fission nucléaire (où l'élongation croît au cours du temps). Dans cette perspective, une large gamme de noyaux lourds a été étudiée, allant des isotopes du Thorium ($Z = 90$) au Nobelium ($Z = 102$). Au total, vingt-six noyaux pair-pairs ont fait l'objet de calculs de courbes d'énergie de déformation : deux isotopes du Thorium (^{230}Th et ^{232}Th), deux isotopes d'Uranium (^{234}U et ^{236}U), l'isotope ^{240}Pu du Plutonium, cinq isotopes du Californium (du ^{248}Cf au ^{256}Cf), treize isotopes du Fermium (du ^{240}Fm au ^{264}Fm) et trois isotopes du Nobelium (du ^{252}No au ^{256}No). Nous en avons déduit les hauteurs de barrières qui ensuite ont été comparées aux valeurs extraites des données expérimentales lorsque celles-ci sont disponibles.

¹Les résultats de ce chapitre (exceptés ceux de la section I.5) ont fait récemment l'objet d'un article soumis pour publication (voir référence [95]).

III.1 Calculs restreints aux symétries axiale et de réflexion

III.1 a Calculs sans correction rotationnelle

Nous avons tout d'abord recherché des solutions à symétries axiale et de réflexion sans inclure la correction énergétique due au mouvement rotationnel de point-zéro. Pour le traitement de l'appariement dans l'approximation de BCS, nous avons utilisé la force de séniorité (calculs HF(SkM*)+BCS(G) symétriques). Les courbes d'énergie de déformation qui en résultent sont représentées sur les figures III.1 et III.2.

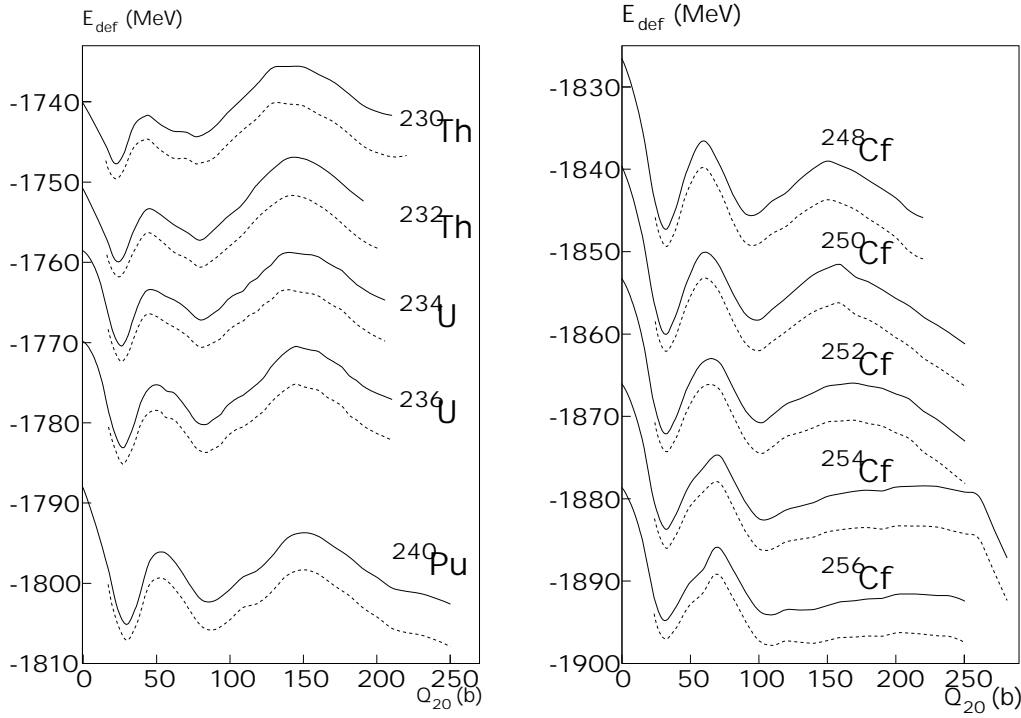


Figure III.1 — Courbes d'énergie de déformation de deux isotopes du Thorium, deux isotopes de l'Uranium et d'un isotope du Plutonium (partie gauche) et de cinq isotopes du Californium (partie droite) dans le formalisme HF(SkM*)+BCS(G) incluant (courbe en tirets) ou non (courbe en trait plein) la correction rotationnelle.

Trois énergies relatives pertinentes vont entrer dans la discussion des résultats. Il s'agit des hauteurs de la première barrière de fission E_A et de la seconde E_B (quant elle existe), ainsi que de l'énergie relative du minimum super-déformé (SD) quand il existe (E_{II}). Dans tous les cas, ces énergies sont calculées par rapport au minimum normalement déformé (ND).

Considérant la solution d'énergie la plus basse en fonction de la déformation (élongation Q_{20}) comme la configuration de l'état fondamental du noyau étudié, on note tout d'abord que les fondamentaux correspondent dans tous les cas rencontrés à des configurations ND, à l'exception du ^{240}Fm (voir tableau III.1). Par ailleurs, la hauteur de la première barrière de fission E_A ne varie pas de façon très prononcée, restant comprise entre 6 et 10 MeV, tandis que E_B subit au contraire une très forte variation quand la masse du noyau A croît.

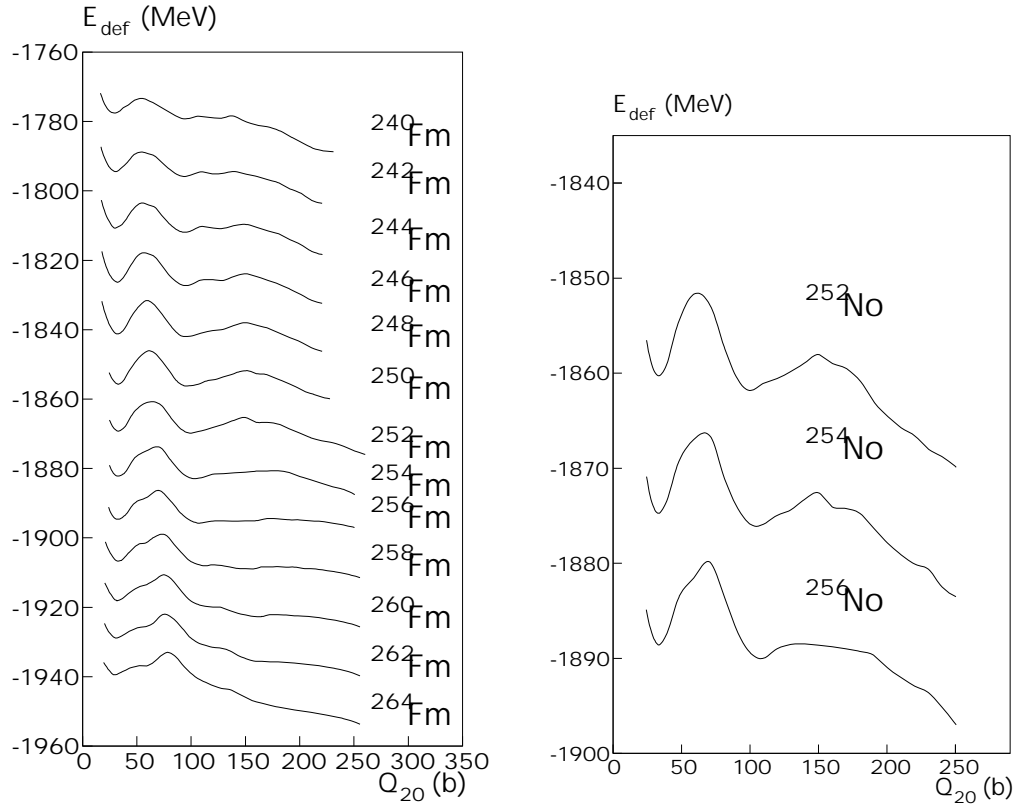


Figure III.2 — Courbes d'énergie de déformation de treize isotopes du Fermium (partie gauche) et de trois isotopes du Nobelium (partie droite) dans le formalisme $HF(SkM^*)+BCS(G)$ avec correction rotationnelle.

Pour les cinq noyaux les plus légers considérés dans cette étude (isotopes du Thorium, de l'Uranium et du Plutonium), la première barrière est plus basse que la seconde ; on constate le contraire pour les autres noyaux.

III.1 b Effet de la correction rotationnelle

Etudions maintenant l'effet produit par l'inclusion de la correction énergétique due au mouvement rotationnel de point-zéro (expression (I-40)). Pour cela, la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{\mathbf{J}}^2$ dans l'état BCS solution $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle$ ainsi que le moment d'inertie \mathcal{I}_{Bel} , qui sont respectivement le numérateur et le dénominateur (à un facteur constant près) de la correction énergétique de l'expression (I-40), ont été représentés sur la figure III.3 (parties gauche et droite respectivement) en fonction du moment quadropolaire de masse Q_{20} pour les cinq isotopes du Californium étudiés dans le paragraphe précédent.

Pour chacun de ces isotopes on obtient des fonctions globalement croissantes avec la déformation, s'annulant au point sphérique ($Q_{20} = 0$)². Toutefois, comme il a déjà été

²Pour \mathcal{I}_{Bel} , cette variation est conforme au comportement classique du moment d'inertie. Quant à celle de $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle$, elle peut se comprendre grâce à l'argument suivant. Plus le noyau est allongé, plus les fonctions d'onde individuelles sont localisées dans une région de l'espace resserrée autour de l'axe z . Par suite, compte tenu de la relation d'incertitude de Heisenberg entre l'angle d'orientation (correspondant ici à l'angle entre l'axe z et une direction fixe arbitraire) et le moment angulaire canoniquement conjugué, les

noté par les auteurs de la référence [32], le terme correctif résultant, proportionnel au rapport de $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle$ et \mathcal{I}_{Bel} , est une fonction croissante de l'élongation pour des valeurs de Q_{20} assez grandes, c'est-à-dire au-delà du minimum ND. Ce comportement devient moins clair aux faibles déformations où, quoi qu'il en soit, l'approximation de spectre rotationnel pour les énergies projetées n'est plus pertinente. C'est pourquoi les courbes d'énergie de déformation corrigées n'apparaissent sur la figure III.1 qu'à partir d'une déformation légèrement inférieure à celle du minimum ND.

Les énergies corrigées de E_A , E_{II} et E_B sont également reportées dans le tableau III.1. Conformément à la discussion ci-dessus sur la dépendance de la correction rotationnelle vis-à-vis de la déformation, il est clair qu'elles sont inférieures aux valeurs non corrigées. Il en résulte, en particulier, que les isotopes de Californium de masse $A \geq 252$, de Fermium et de Nobelium considérés dans ce travail ont des solutions super-déformées plus basses que celles normalement déformées, la différence pouvant atteindre 1.5 MeV pour les noyaux les plus lourds. Cela signifierait que, dans ces noyaux, le minimum ND devient un état isomérique par rapport au minimum SD qui est alors interprété comme l'état fondamental. Remarquons toutefois que les deux minima du ^{250}Fm sont quasiment dégénérés : l'état SD est à peine 100 keV plus bas que l'état ND. Ces résultats ne sont pas contradictoires avec l'observation, par exemple, de ^{254}No à travers une cascade γ dans sa bande de rotation normalement déformée. En effet, cet isotope du Nobelium a été obtenu expérimentalement, par exemple par Reiter *et al.* [96], comme un résidu d'évaporation de la réaction $^{208}\text{Pb}(^{48}\text{Ca}, 2n)$ avec une énergie d'excitation d'environ 8 MeV. Cette énergie est bien supérieure à la hauteur de la seconde barrière du ^{254}No vue depuis le minimum SD, c'est-à-dire la quantité $E_B - E_{II} = 3.6$ MeV, de sorte qu'il serait difficile d'observer la cascade γ du résidu d'évaporation dans le puits super-déformé et ce, à cause de la compétition avec le processus de décroissance par fission spontanée qui est nettement favorisé. Puisque dans nos calculs $E_A = 8.6$ MeV (avec toutefois une limitation aux formes symétriques pour ces calculs en particulier), l'état isomérique ND est moins sujet à une telle instabilité.

III.2 Etude systématique des isotopes pairs du Fm

Nous abordons dans cette section un fait marquant de l'évolution de la hauteur de la seconde barrière (symétrique de réflexion) dans les isotopes pairs du Fermium en fonction de leur masse A , que l'on peut voir clairement dans le tableau III.1, sur la figure III.2 et surtout sur la partie supérieure de la figure III.4. La barrière corrigée apparaît pour $A = 242$, croît jusqu'à 3.9 MeV pour $A = 252$ puis chute à mesure que A augmente. Elle s'annule quasiment pour $A = 256$ (avec $E_B = 0.1$ MeV), correspondant à une courbe d'énergie de déformation plate au-delà de $Q_{20} = 100$ b dans le cas symétrique de réflexion. Pour un nombre de neutrons supérieur à $N = 152$, la barrière de fission des isotopes pairs du Fermium ne possède qu'une seule bosse. Au-delà du sommet de cette barrière, la courbe garde une pente négative pour des valeurs croissantes de Q_{20} , chutant de plus en plus à mesure que A croît. Il est intéressant de constater que cette variation de E_B peut être corrélée avec celle du temps de vie expérimental de fission T_f dans les isotopes

fonctions d'onde sont d'autant plus largement distribuées en spin que l'élongation du noyau est importante, ce qui contribue à accroître l'écart quadratique moyen du moment angulaire, donc la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$, avec Q_{20} .

pairs du Fermium [97] (voir la partie inférieure de la figure III.4). Plus précisément, la valeur maximale de T_f observée pour le ^{252}Fm peut s'expliquer par le fait que E_B atteint son maximum pour le même isotope. En outre, la brusque diminution de T_f à partir de $A = 256$ est soupçonnée d'être due à la disparition de la seconde barrière de fission pour cet isotope. Il faut aussi remarquer que la première barrière présente globalement la même variation que E_B , avec une amplitude moindre toutefois. En effet, les valeurs corrigées de E_A croissent de 4.2 MeV pour $A = 242$ à 9.6 MeV pour $A = 248$ et $A = 250$ puis décroissent jusqu'à 6.5 MeV pour le ^{264}Fm . Il convient de mentionner que les calculs de T_f par Warda *et al.* [37] reproduisent l'allure expérimentale de $T_f(A)$ (voir figure 14 de cette référence).

A ce stade, nous ne comparons pas encore les hauteurs de barrières de fission calculées avec les données expérimentales (lorsqu'elles sont disponibles), car il est bien connu qu'elles peuvent être abaissées en autorisant des formes triaxiales autour de la première barrière, et des formes asymétriques de réflexion autour de la seconde. Cette comparaison fait l'objet de la section suivante où l'on présente les résultats des calculs dans lesquels ces contraintes de symétrie sont levées.

III.3 Effets des brisures de symétries sur les barrières de fission

III.3 a Calculs triaxiaux autour de la première barrière

L'influence des déformations triaxiales sur la première barrière de fission a été étudiée pour quatre noyaux parmi les vingt-six mentionnés précédemment, à savoir deux isotopes de l'Uranium (^{234}U et ^{236}U), le ^{240}Pu et le ^{252}Cf . Du minimum ND au minimum SD nous avons effectué des calculs autorisant le noyau à explorer des formes triaxiales. Ce degré de liberté supplémentaire conduit bien sûr à des nouvelles courbes d'énergie de déformation plus basses que celles limitées aux formes axiales, comme le montre la figure III.5. Il a été vérifié attentivement pour chaque noyau que la solution d'énergie minimale passe continûment d'une forme axiale à une forme triaxiale au voisinage du sommet de la première barrière. Alors que l'effet sur E_A est faible dans les trois isotopes les plus légers ($\Delta E_A \sim 0.5$ MeV), il est beaucoup plus marqué pour le ^{252}Cf où l'on obtient $\Delta E_A \sim 2$ MeV.

L'existence d'une telle brisure de symétrie est illustrée dans le cas particulier du ^{252}Cf sur la figure III.6 où cinq coupes de la surface d'énergie potentielle de déformation dans la direction de Q_{22} à différentes elongations Q_{20} autour du sommet de la première barrière ont été tracées. En effet, la valeur de Q_{22} de la solution énergétiquement la plus favorable s'annule pour la première et la dernière coupes et atteint sa valeur maximale pour $Q_{20} \approx 65$ b. Cette déformation se trouve aussi être approximativement celle du sommet de la barrière pour une solution axiale. Elle est associée à la différence maximale d'énergie entre des solutions axiale et non axiale comme on peut le voir sur la figure III.5. La coupe à $Q_{20} = 65$ b sur la figure III.6 montre que la différence d'énergie associée à la brisure de symétrie axiale s'élève à 2 MeV environ, conduisant ainsi à une valeur de E_A triaxiale de 8.1 MeV.

Comme il a été précisé dans la section I.1 c, la correction rotationnelle n'a pas été explicitement calculée dans le cas triaxial. Pour la prendre approximativement en compte,

nous avons soustrait à l'énergie triaxiale l'énergie rotationnelle calculée dans le cas axial à la même déformation Q_{20} . Ainsi que nous l'avons discuté, la position du sommet triaxial de la première barrière coïncide quasiment avec celle du sommet axial. De plus, la correction rotationnelle ne modifie presque pas l'élongation du sommet. Par conséquent, puisque le minimum ND correspond à une solution axiale, la hauteur de la barrière triaxiale calculée avec correction rotationnelle peut être facilement estimée comme la différence entre l'énergie corrigée du minimum ND et celle approximativement corrigée (selon la procédure ci-dessus) du sommet triaxial.

Le tableau III.2 présente les valeurs théoriques de E_A obtenues comme il vient d'être expliqué ainsi que les valeurs extraites des données expérimentales des références [98–100]. L'accord est plutôt bon pour les deux isotopes de l'Uranium (à 0.6 MeV près). Nos estimations pour le ^{240}Pu et le ^{252}Cf sont trop grandes de 1.3 et 1.8 MeV respectivement. Concernant le premier des deux précédents noyaux, notre résultat est légèrement plus proche de la valeur expérimentale que celle obtenue dans les calculs Hartre-Fock-Bogoliubov avec la force de Gogny effectués par les auteurs des références [34, 35].

III.3 b Calculs asymétriques de réflexion autour de la deuxième barrière

Discussion générale

L'influence de la brisure de parité sur la seconde barrière de fission a fait l'objet d'une étude particulière dans le cas des quatre noyaux considérés dans le paragraphe précédent auxquels nous avons ajouté les isotopes ^{230}Th et ^{232}Th du Thorium. Du minimum SD jusque bien au-delà du deuxième point-selle, nous avons effectué des calculs HF(SkM*)+BCS(G) dans lesquels les noyaux peuvent explorer des formes asymétriques de réflexion (gauche–droite) et axiales. Plus précisément, partant d'une solution symétrique de réflexion à une déformation Q_{20} donnée, nous avons cherché une solution d'équilibre associée à une valeur non nulle du moment octupolaire axial Q_{30} à la même élongation. Procédant ainsi, nous avons trouvé que, dans tous les cas, les valeurs du moment hexadécapolaire axial Q_{40} défini par :

$$Q_{40} = \int d^3\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) Y_4^0(\theta, \phi), \quad (\text{III-1})$$

ne variaient pas très fortement (typiquement inférieure à 10 %), excepté pour le ^{252}Cf où l'écart entre les valeurs de Q_{40} correspondant aux solutions symétriques et asymétriques atteint 40 % à $Q_{20} = 150$ b puis décroît pour finir en-dessous de 10 %. C'est ce que montre la figure III.7. En traçant à la fois les courbes symétriques et non-symétriques gauche–droite en fonction de Q_{20} , nous avons trouvé que ces dernières sont plus basses que les premières (voir figure III.8), comme il avait été prédit notamment par les calculs micro-macroscopiques du type de ceux de P. Möller *et al.* [27].

Pour tous les noyaux étudiés les courbes d'énergie de déformation associées aux solutions asymétriques présentent la même allure. Plus précisément, du minimum SD jusqu'à un certain point dit de « branchement » (dont l'abscisse dépend du noyau considéré), la solution symétrique gauche–droite est la plus favorable du point de vue énergétique. Ensuite, de ce point jusque bien au-delà du second point-selle, la solution asymétrique devient la plus basse. Par ailleurs, le point de branchement coïncide quasiment avec le sommet

de la seconde barrière asymétrique, rendant plutôt soudaine la transition symétrique–asymétrique.

Pour illustrer de façon plus détaillée une de ces transitions, nous avons étudié l'exemple particulier du ^{252}Cf . Pour cela, nous avons effectué des calculs avec contraintes à la fois sur Q_{20} et Q_{30} de manière à obtenir des coupes de la surface d'énergie potentielle de déformation dans la direction de Q_{30} à différentes elongations. Les résultats correspondants apparaissent sur la figure III.9. La courbe associée à $Q_{20} = 130$ b présente un seul minimum bien prononcé pour une forme symétrique alors qu'à plus hautes valeurs de Q_{20} , un second minimum local apparaît pour une valeur non nulle de Q_{30} . Continuant à augmenter Q_{20} , le premier minimum s'estompe et disparaît même au-delà de $Q_{20} = 140$ b, tandis que le second minimum devient énergétiquement plus favorable. La transition entre ces deux vallées ne s'effectue probablement pas par effet tunnel entre deux vallées qui « se croisent », mais plutôt par diminution progressive de la crête les séparant jusqu'à disparition totale lorsque les deux minima locaux deviennent quasi-dégénérés. Dans l'encart supérieur de la figure III.9 a été représentée la variation de la valeur de Q_{30} associée à la solution d'énergie la plus basse en fonction de Q_{20} . L'allure obtenue rappelle une transition de phase du premier ordre où le paramètre d'ordre serait Q_{30} . Dans cette image, la valeur critique de l'elongation est $Q_{20}^c = 140$ b.

En ce qui concerne la forme des secondes barrières, il apparaît qu'elle est profondément modifiée lorsque l'on prend en compte le degré de liberté supplémentaire associé aux formes asymétriques gauche–droite, avec deux cas extrêmes. D'une part, celui des isotopes les plus légers (ceux du Thorium) pour lesquels, quand on autorise des formes asymétriques, la hauteur de la barrière est considérablement diminuée (de près de 6 MeV) tandis que sa largeur n'est pas modifiée, d'autre part le cas du noyau le plus lourd considéré dans ce paragraphe (à savoir le ^{252}Cf) pour lequel au contraire la barrière n'est que légèrement abaissée (d'environ 1 MeV) alors que sa largeur est fortement diminuée. Entre ces deux cas on trouve des situations intermédiaires pour les isotopes d'Uranium et de Plutonium. Cela indique clairement qu'un calcul pertinent de temps de vie de fission doit bien sûr tenir compte de cette brisure de symétrie.

Dans le tableau III.2, les hauteurs des deuxième barrières expérimentales et théoriques (incluant l'effet asymétrique) sont comparées pour les six noyaux étudiés ici. La correction rotationnelle a été incluse suivant l'approximation présentée dans la section I.1 c du chapitre II (expression (I-40)). Pour les noyaux ^{234}U , ^{236}U et ^{240}Pu , seule la brisure de symétrie gauche–droite permet d'obtenir, conformément à l'expérience, une deuxième barrière comparable à ou plus basse que la première. Au-delà de cet accord qualitatif, il faut souligner que la différence entre les valeurs expérimentales et théoriques de E_B n'excède généralement pas 1 MeV, excepté pour les deux isotopes les plus légers pour lesquels l'écart atteint 2 MeV. Ces résultats sont donc plutôt encourageants.

Hyperdéformation dans les isotopes de Thorium

Les courbes asymétriques d'énergie de déformation des isotopes ^{230}Th et ^{232}Th présentent un troisième minimum local à très grande déformation correspondant à un troisième minimum dit hyperdéformé (HD). Ce puits a été observé expérimentalement (voir par exemple la référence [101]) mais il est trouvé plutôt peu prononcé dans nos calculs. Cette caractéristique des isotopes 230 et 232 du Thorium a déjà été obtenue par les calculs HFB de J.-F. Berger et collaborateurs [34, 35] utilisant l'interaction effective de Gogny dans

sa paramétrisation D1S à la fois dans le canal particule-trou et dans le canal particule-particule. En particulier les précédents auteurs ont prédit que le puits HD est plus profond pour le ^{230}Th que pour le ^{232}Th . Comme le montre le tableau III.2, présentant les énergies du troisième minimum E_{III} et de la troisième barrière de fission E_C par rapport au minimum ND, nos calculs confirment cette prédiction. En effet, les profondeurs du puits HD dans les deux isotopes, c'est-à-dire les valeurs $E_C - E_{III}$, sont du même ordre de grandeur dans les deux calculs (elles valent quelques centaines de keV) et nous avons aussi trouvé que la valeur de E_{III} pour le ^{230}Th est inférieure à celle pour le ^{232}Th . Pour terminer cette étude de l'hyperdéformation dans les isotopes du Thorium, il est intéressant de noter que la profondeur du puits HD du ^{230}Th estimée par J. Blons [101], $(E_C - E_{III})_{\text{exp}} \approx 0.3 \text{ MeV}$, et celle déduite de nos calculs, $(E_C - E_{III})_{\text{th}} \approx 0.4 \text{ MeV}$, sont très voisines.

III.4 Effet de la force de pairing sur les barrières de fission

Nous avons étudié la dépendance de nos résultats par rapport au choix effectué pour l'interaction résiduelle servant à calculer l'effet des corrélations d'appariement. Dans ce but, nous avons remplacé l'interaction résiduelle de séniorité par une interaction δ indépendante de la densité, tout en imposant aux solutions de posséder la symétrie axiale et la symétrie de réflexion et en incluant la correction rotationnelle. Cinq noyaux parmi les vingt-six mentionnés en début de chapitre ont fait l'objet de tels calculs : les isotopes ^{250}Cf et ^{252}Cf du Californium, ^{256}Fm et ^{260}Fm du Fermium et ^{254}No du Nobelium.

Tout d'abord nous avons comparé les résultats des calculs HF(SkM*)+BCS(G) et HF(SkM*)+BCS(δ) sur la figure III.10 qui représente les courbes d'énergie de déformation sans correction rotationnelle. Les courbes apparaissent tout à fait similaires dans les deux cas. En particulier, les configurations fondamentales sont toujours associées à des déformations normales et les valeurs correspondantes de Q_{20} sont proches de celles obtenues dans l'approche HF(SkM*)+BCS(G) (à 1 b près). Pour les minima SD, les valeurs de Q_{20} correspondantes diffèrent d'au plus 5 b de celles fournies par les calculs HF(SkM*)+BCS(G). De plus, par les calculs HF(SkM*)+BCS(δ) on trouve une valeur de E_B faible et dans le ^{260}Fm la barrière de fission n'a qu'une seule bosse. C'est précisément ce qui a été obtenu dans les calculs HF(SkM*)+BCS(G). Néanmoins, il faut noter que l'allure détaillée des courbes HF(SkM*)+BCS(δ) est moins lisse, notamment pour les deux isotopes de Californium considérés ici. En effet, on peut voir sur les courbes en trait plein de la figure III.11 (avec une échelle différente de celle de la figure III.10) que le sommet de la seconde barrière (symétrique de réflexion, rappelons-le) présente un troisième puits, dont la profondeur n'excède pas 750 keV. Cela provient des effets de structure dans les éléments de matrice $\langle i\bar{i}|\hat{V}_\delta|\tilde{j}\tilde{j}\rangle$ inhérents à la force δ . Prenant l'exemple du ^{250}Cf , pour lequel l'effet est le plus significatif, le fond du puits se situe à environ $Q_{20} = 160 \text{ b}$, où le spectre individuel est le siège de deux phénomènes. D'une part, trois états de neutrons se trouvent être quasiment dégénérés au niveau de Fermi, conduisant de fait à de fortes corrélations d'appariement entre les neutrons. D'autre part, l'énergie d'appariement des protons subit une baisse brutale de 4.5 MeV entre 150 b et 160 b, pour ensuite rester constante à 0.3 MeV près jusqu'à 180 b. Ces deux phénomènes apparaissent clairement lorsque l'on regarde les courbes d'énergie d'appariement (pour les neutrons E_n et les protons E_p séparément) en

fonction de l'élongation, sur la figure III.12. Elles induisent un minimum local dans la variation d'énergie totale d'appariement E_{pair} tel qu'on peut le voir sur la figure III.12 où E_{pair} a été représentée avec E_n et E_p .

Nous avons aussi effectué des calculs incluant la correction rotationnelle exposée dans la section I.1 c du chapitre II. Les résultats correspondants sont présentés sur les figures III.11 et III.13. On en déduit que la correction rotationnelle produit le même effet que celui discuté au paragraphe III.1 b ci-dessus. Les hauteurs de barrières et les énergies isomériques, sans et avec correction, sont reportées dans le tableau III.3 avec celles déduites des calculs HF(SkM*)+BCS(G). Regardons les valeurs corrigées : on constate que les hauteurs de barrières obtenues avec les deux forces résiduelles d'appariement diffèrent de moins de 1 MeV, à l'exception de E_B pour le ^{254}No avec un écart atteignant 1.7 MeV. Ces deux interactions plutôt différentes donnent donc globalement les mêmes barrières de fission. Il est donc raisonnable de penser que ces deux approches fournissent une bonne description du processus de fission au moins jusqu'au deuxième point-selle.

III.5 Effet de la dépendance en déformation de l'appariement

Le traitement approché de la dépendance de l'interaction d'appariement vis-à-vis de la solution, développé dans la section I.5, a été appliqué au calcul symétrique (de révolution et de réflexion) de courbe d'énergie de déformation dans le cas de l' ^{234}U et du ^{252}Cf , sans inclure le traitement approché du mouvement rotationnel de point-zéro. Les courbes corrigées ou non de la dépendance en déformation pour chacun de ces deux noyaux sont représentées sur la figure III.14. Il apparaît clairement que cette correction approchée a pour effet de lisser les légères irrégularités observées sur les courbes en trait plein, conformément au but dans lequel elle a été mise au point. En effet, ces irrégularités, certes faibles, sont très probablement dues à la sélection des états individuels dans l'approximation BCS, malgré un facteur de coupure adouci, et notre correction semble capable de les estomper. En outre, son effet sur les hauteurs des barrières reste assez faible comme le montre le tableau III.4. Par conséquent, la dépendance en Q_{20} de la sélection des états participant aux corrélations d'appariement affecte assez peu les hauteurs de barrière, ce qui semble accréditer le traitement de ces corrélations dans le cadre de l'approximation BCS avec troncature de l'espace de valence.

III.6 Conclusion sur les calculs HF+BCS de barrières de fission

Les résultats présentés ci-dessus montrent que l'approche microscopique de champ moyen Hartree-Fock avec l'interaction effective de Skyrme SkM*, associée à l'approximation BCS avec une interaction phénoménologique d'intensité raisonnable, incluant la correction rotationnelle et les brisures de symétrie axiale et de réflexion, est apte à fournir une description globalement satisfaisante des barrières de fission dans une région s'étendant des actinides aux isotopes du Nobelium. En particulier, on peut conclure que la paramétrisation choisie ici, SkM*, est bien adaptée à de tels calculs, conformément au but dans lequel elle a été mise au point [42].

Rappelons que nos calculs de hauteurs de barrière dans les isotopes pairs du Fermium sont restreints à la symétrie de réflexion. Par conséquent, la partie supérieure de la figure III.4 représente une borne supérieure des valeurs de E_B en fonction de A . Comme la deuxième barrière symétrique n'existe que pour $242 \leq A \leq 256$, seule la partie de la courbe entre ces deux valeurs de A sera éventuellement affectée par la brisure de symétrie de parité.

Par ailleurs, un meilleur traitement des corrélations d'appariement permettrait de remédier aux problèmes que peuvent poser les gaps d'énergie dans le spectre individuel au voisinage du niveau de Fermi. Cela est absolument nécessaire pour une bonne description des barrières de fission des noyaux ayant au moins un type de nucléons en nombre impair, notamment en ce qui concerne l'énergie dite de spécialisation. Ce travail est actuellement en cours [77].

Concernant la correction énergétique due au mouvement rotationnel de point-zéro (I-40), il semble d'après des calculs de barrières de fission avec projection sur les états de bon J (états propres de \hat{J}^2) par P.-H. Heenen [68] qu'elle ait été surestimée dans nos calculs si l'on interprète ces derniers comme correspondant à une projection approchée sur l'état fondamental 0^+ . Autrement dit, les hauteurs des secondes barrières E_B notamment seraient sous-estimées. Toutefois, il faut aussi tenir compte du fait que, même si la brisure de la symétrie de parité (au voisinage de la deuxième barrière de fission) a conduit à des solutions plus basses en énergie, ces dernières ne correspondent pas à des états de bonne parité. En projetant sur les états de parité positive, on obtiendrait une correction énergétique supplémentaire abaissant la barrière, comme il a été montré par P. Bonche *et al.* dans un contexte voisin [102]. Nos résultats sont donc sujets à une modification qui dépend directement de la différence entre les effets des deux projections ci-dessus sur l'énergie relative autour du deuxième point-selle, quantité pour l'instant inconnue.

Tableau III.1 — *Energies relatives (en MeV) de la première barrière, du minimum super-déformé et de la seconde barrière par rapport à l'énergie du minimum normalement déformé pour 26 noyaux calculés dans l'approche HF(SkM*)+BCS(G). Elles sont évaluées sans et avec correction rotationnelle. Aucune valeur de E_{II} ni E_B n'est donnée pour les isotopes du Fm plus lourds que le ^{256}Fm et plus légers que le ^{242}Fm puisque les barrières de fission de ces isotopes ne présentent qu'une bosse.*

Noyau	E_A		E_{II}		E_B	
	sans	avec	sans	avec	sans	avec
^{230}Th	6.0	4.9	3.3	1.8	12.1	9.3
^{232}Th	6.5	5.5	2.7	1.2	12.9	10.0
^{234}U	6.8	5.8	3.2	1.8	11.7	9.0
^{236}U	7.9	6.7	2.9	1.5	12.6	10.0
^{240}Pu	9.0	7.6	2.8	1.3	11.4	8.8
^{248}Cf	10.7	9.6	2.0	0.1	8.3	5.7
^{250}Cf	10.3	9.2	1.7	0.1	8.5	5.8
^{252}Cf	10.1	9.1	1.3	-0.3	6.0	3.7
^{254}Cf	9.0	8.0	1.2	-0.3	5.2	2.6
^{256}Cf	8.9	7.9	0.7	-0.8	3.2	0.7
^{240}Fm	5.2	4.2	-0.1		1.4	
^{242}Fm	6.6	5.6	0.1	-1.4	2.3	0.0
^{244}Fm	8.3	7.2	0.3	-1.2	3.6	1.0
^{246}Fm	9.4	8.1	0.6	-1.0	5.1	2.4
^{248}Fm	10.9	9.6	0.9	-0.7	6.0	3.3
^{250}Fm	10.8	9.6	1.1	-0.1	6.4	3.8
^{252}Fm	9.2	8.1	1.1	-0.6	6.5	3.9
^{254}Fm	9.3	8.2	0.8	-0.7	4.0	1.5
^{256}Fm	9.3	8.3	0.3	-1.1	2.5	0.1
^{258}Fm	8.6	7.5				
^{260}Fm	8.7	7.4				
^{262}Fm	7.8	6.7				
^{264}Fm	7.6	6.5				
^{252}No	9.6	8.6	0.1	-1.5	4.8	2.2
^{254}No	9.6	8.6	0.4	-1.4	4.7	2.2
^{256}No	9.7	8.7	0.1	-1.5	2.2	0.1

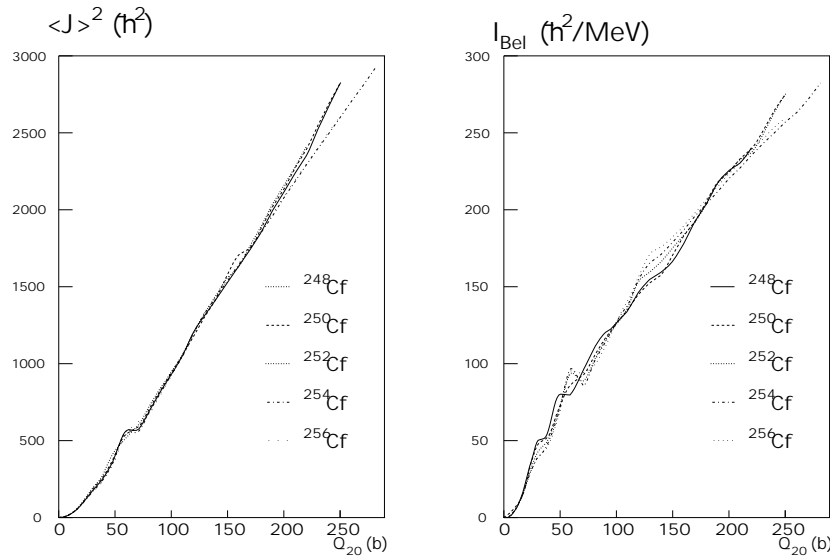


Figure III.3 — Valeur moyenne de l'opérateur \hat{J}^2 (en unités d' \hbar^2) et moment d'inertie I_{Bel} calculé par la formule de Belyaev (en unités d' $\hbar^2 \text{MeV}^{-1}$) en fonction de Q_{20} (en barns) dans l'approche $\text{HF}(\text{SkM}^*) + \text{BCS}(G)$ pour cinq isotopes du Californium.

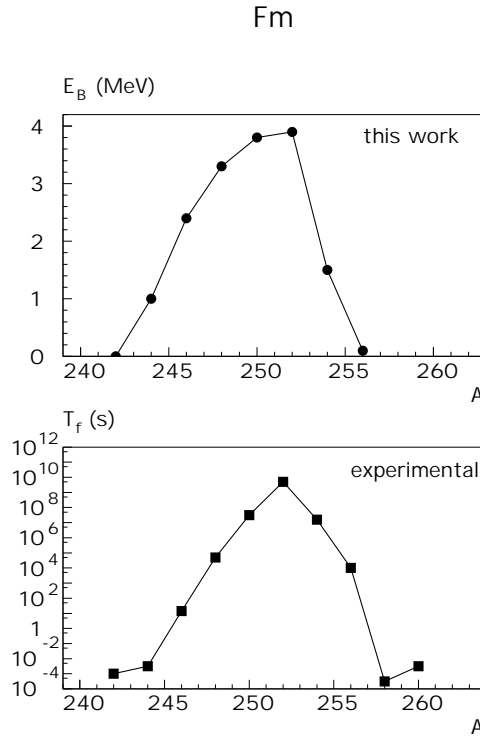


Figure III.4 — Hauteurs calculées de la seconde barrière symétrique (en MeV) incluant la correction rotationnelle (partie supérieure) et temps de vie de fission mesurés en secondes (partie inférieure) d'isotopes pairs du Fermium. Les données expérimentales sont extraites de la référence [97].

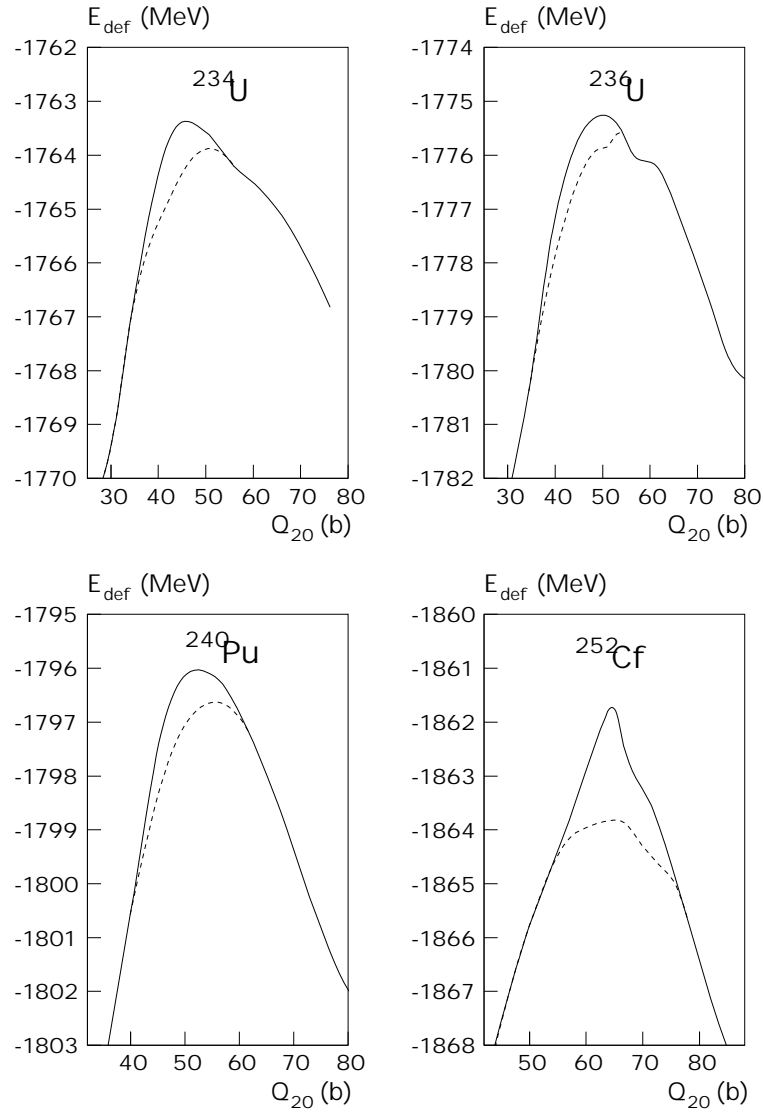


Figure III.5 — Première barrière des isotopes ^{234}U , ^{236}U , ^{240}Pu et ^{252}Cf dans le formalisme HF(SkM*)+BCS(G) sans la correction rotationnelle. La courbe d'énergie axiale (respectivement triaxiale) apparaît en trait plein (respectivement en tirets).

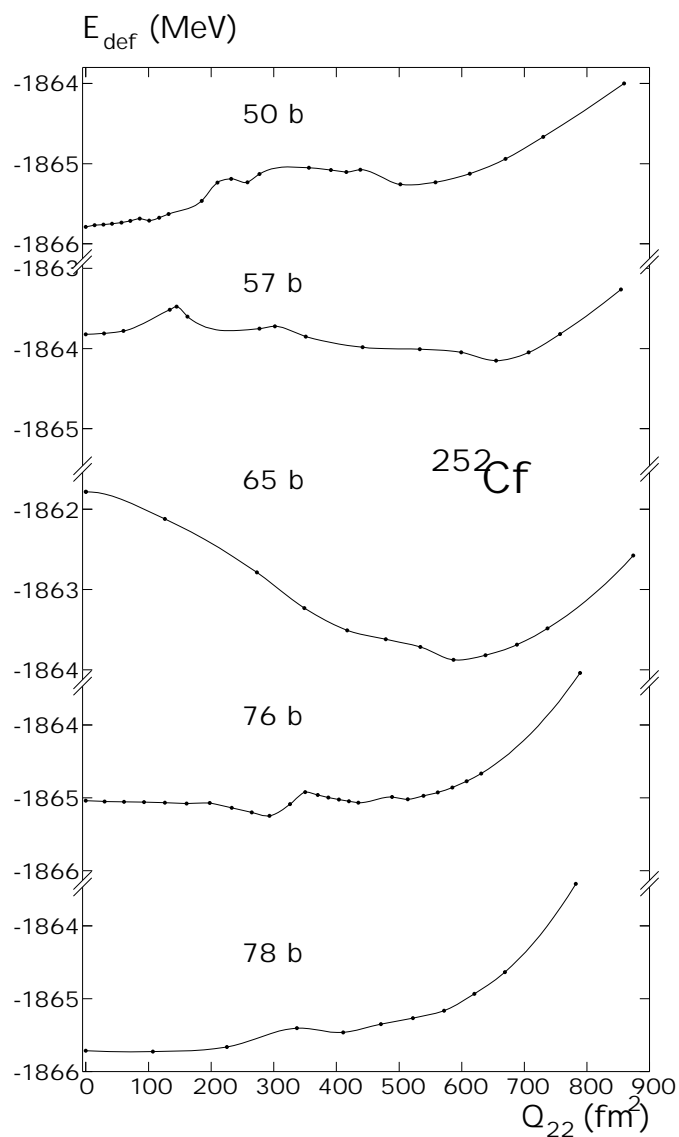


Figure III.6 — Coupes de la surface d'énergie potentielle de déformation du ^{252}Cf en fonction de Q_{22} (en fm^2) à différentes elongations Q_{20} autour du sommet de la première barrière. De haut en bas, les différentes courbes correspondent à des valeurs croissantes de Q_{20} . Elles sont tracées à la même échelle.

Tableau III.2 — Hauteurs de barrières et énergies isomériques (en MeV) expérimentales (lorsqu'elles sont disponibles) et théoriques (HF(SkM*)+BCS(G)+correction rotationnelle) de six noyaux lourds. Les données expérimentales proviennent de [98], excepté pour le ^{252}Cf [99] et pour la valeur de E_{II} dans le ^{232}Th [100]. L'énergie relative E_{III} du minimum HD et la hauteur de la troisième barrière E_C des isotopes du Thorium sont comparées avec les résultats de J.-F. Berger et al. [35]. Les valeurs apparaissant avec un astérisque correspondent à des solutions axiales.

Noyau	E_A		E_{II}		E_B		E_{III}		E_C	
	exp.	ce trav.	exp.	ce trav.	exp.	ce trav.	[35]	ce trav.	[35]	ce trav.
^{230}Th	6.1	4.9*		1.8	6.5	4.4	5.0	3.2	5.7	3.6
^{232}Th	5.8	5.5*	2.8	1.2	6.2	4.1	4.2	2.7	4.3	3.0
^{234}U	5.6	5.3		1.8	5.5	5.1				
^{236}U	5.6	6.2	2.3	1.5	5.6	4.6				
^{240}Pu	5.6	7.1	2.4	1.3	5.1	4.1				
^{252}Cf	5.3	7.1		-0.3	3.5	2.9				

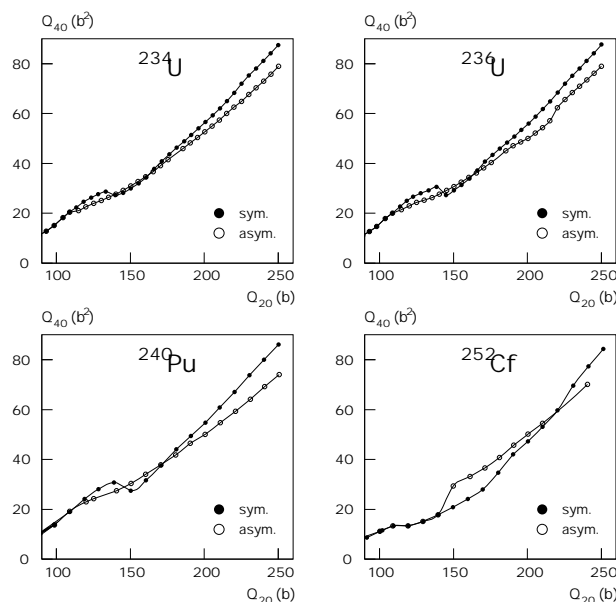


Figure III.7 — Valeurs de Q_{40} (en barns²) en fonction de Q_{20} (en barns) correspondant à des calculs asymétriques (courbes en tirets) comparées à celles obtenues dans des calculs symétriques (courbes en trait plein), pour les quatre isotopes ^{234}U , ^{236}U , ^{240}Pu et ^{252}Cf .

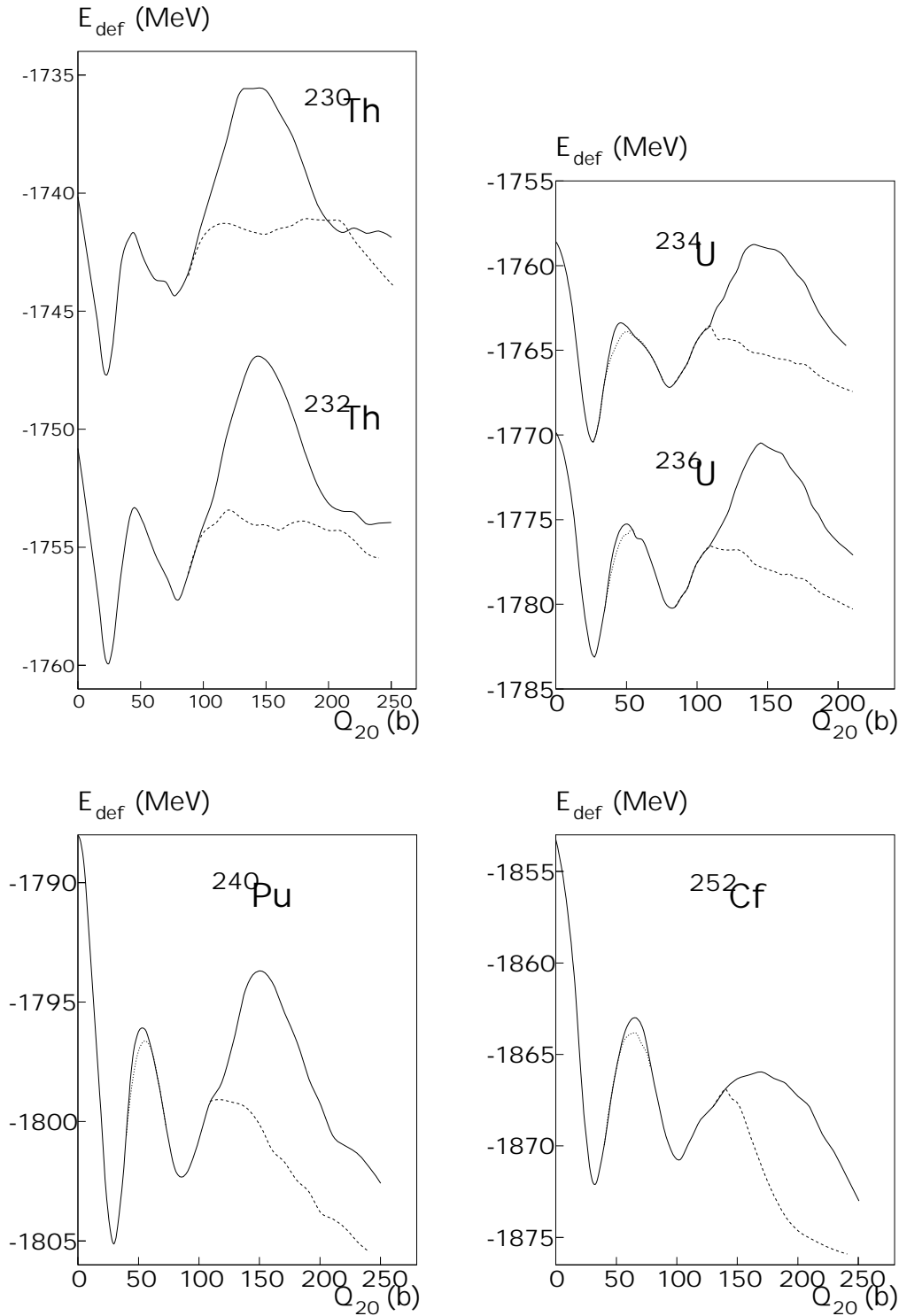


Figure III.8 — Courbes d'énergie de déformation des isotopes $^{230,232}\text{Th}$ (partie supérieure gauche), $^{234,236}\text{U}$ (partie supérieure droite), ^{240}Pu (partie inférieure gauche) et ^{252}Cf (partie inférieure droite) dans le formalisme HF(SkM*)+BCS(G) sans correction rotationnelle. Les courbes en pointillés correspondent à des calculs triaxiaux et symétriques de réflexion (pour les isotopes d'Uranium uniquement), tandis que l'effet asymétrique est indiqué par les courbes en tirets, celles en trait plein correspondant à des calculs symétriques.

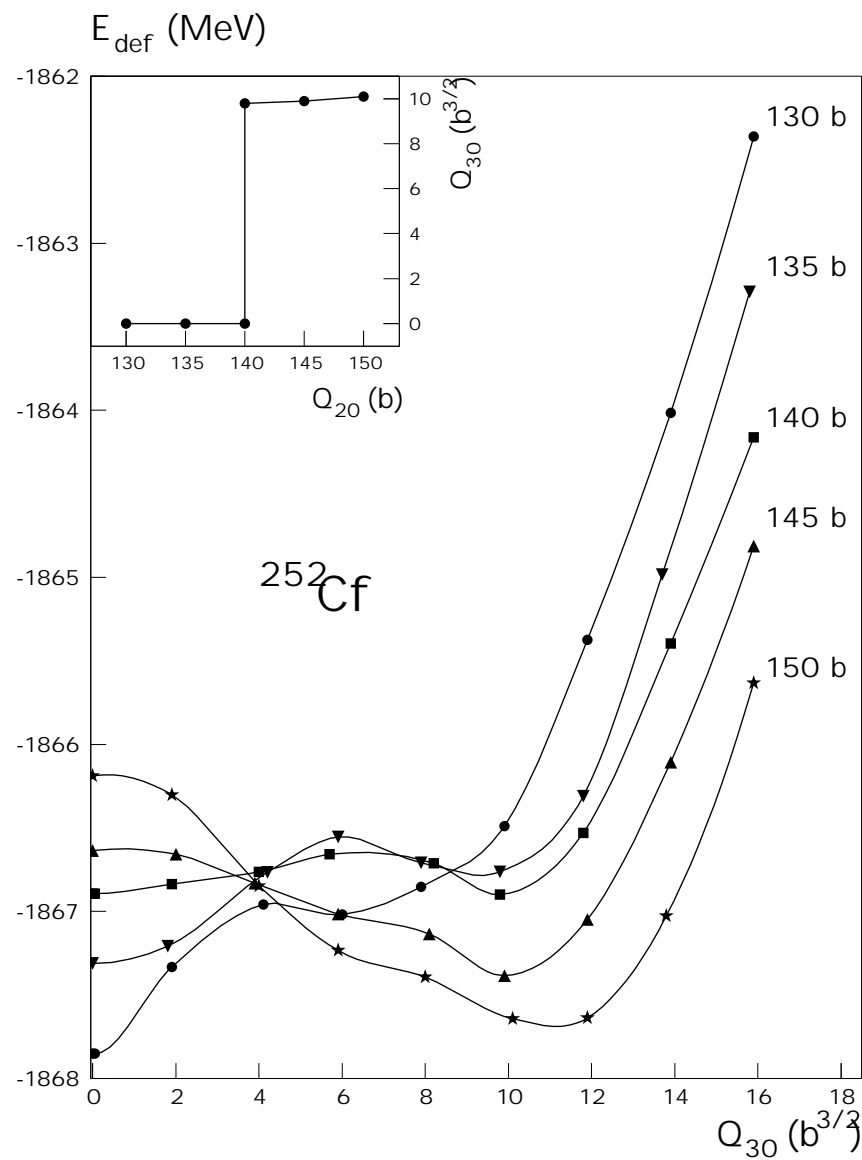


Figure III.9 — Coupes de la surface d'énergie potentielle de déformation en fonction du moment octupolaire axial Q_{30} (en $\text{barns}^{3/2}$) pour le ^{252}Cf à différentes elongations autour du sommet de la seconde barrière.

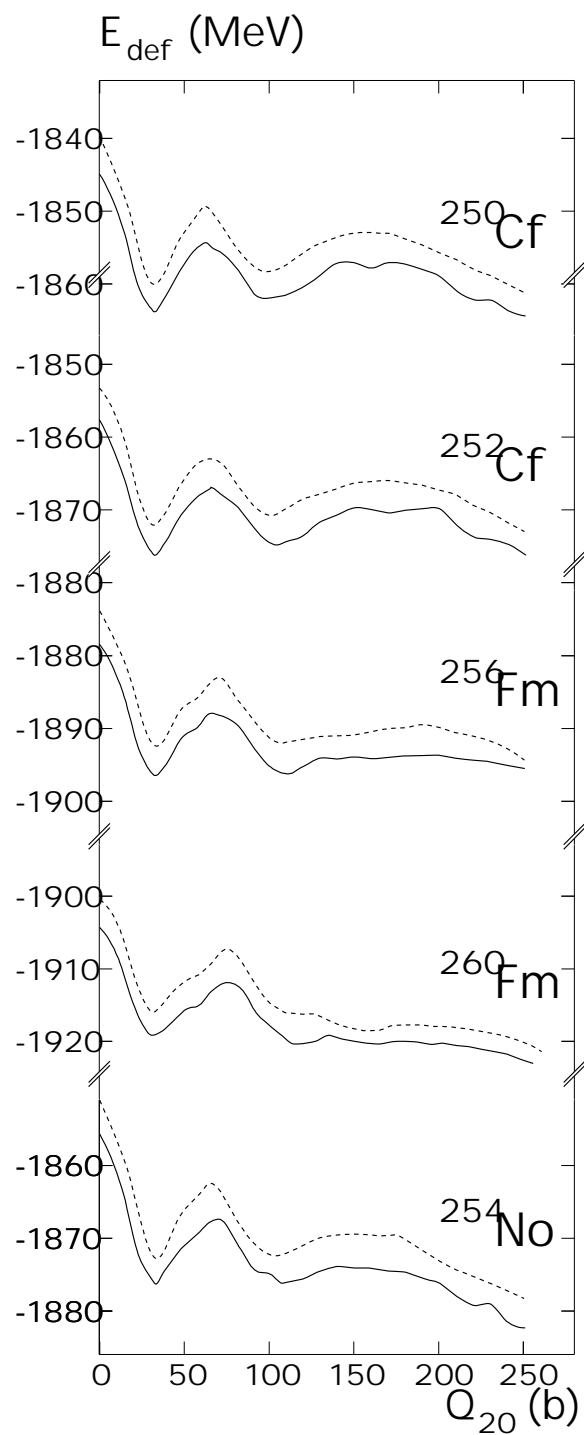


Figure III.10 — Comparaison des courbes d'énergie de déformation de cinq noyaux dans les formalismes $HF(SkM^*)+BCS(G)$ (tirets) et $HF(SkM^*)+BCS(\delta)$ (trait plein) sans correction rotationnelle.

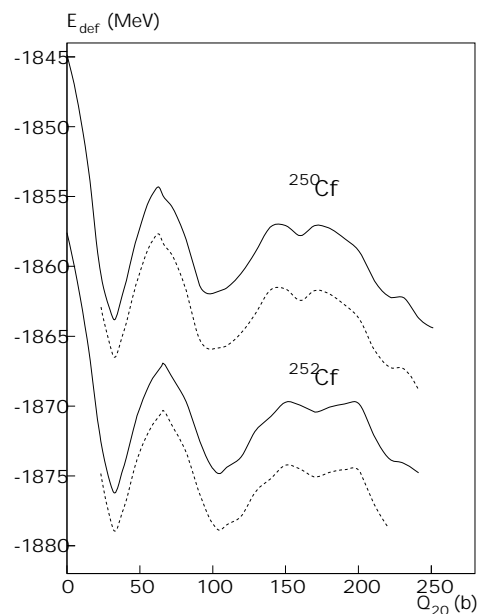


Figure III.11 — Courbes d'énergie de déformation des deux isotopes ^{250}Cf et ^{252}Cf du Californium dans le formalisme $\text{HF}(\text{SkM}^*)+\text{BCS}(\delta)$. Pour chaque noyau, les courbes en tirets (respectivement trait plein) correspondent à des calculs avec (respectivement sans) correction rotationnelle.

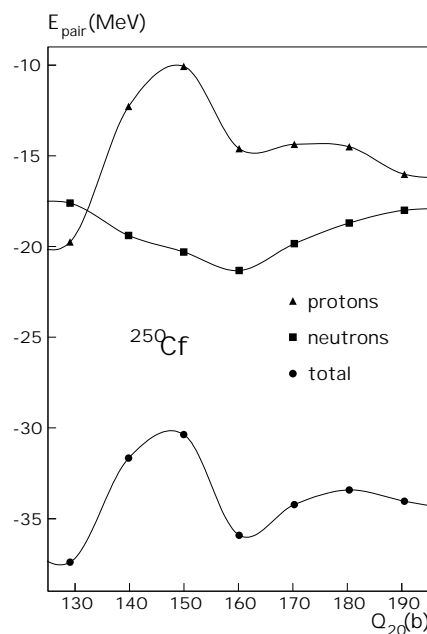


Figure III.12 — Energies d'appariement des neutrons, protons et totale obtenues par des calculs $\text{HF}(\text{SkM}^*)+\text{BCS}(\delta)$ au niveau de la seconde barrière du ^{250}Cf .

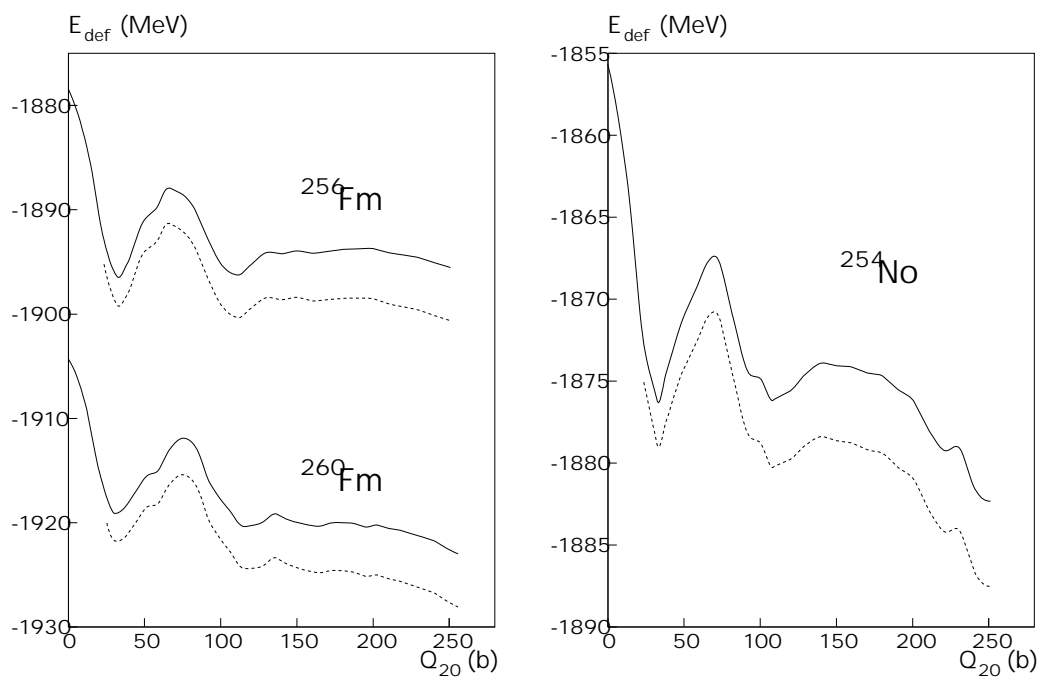


Figure III.13 — Identique à la figure III.11 pour les isotopes $^{256,260}\text{Fm}$ (à gauche) et ^{254}No (à droite).

Tableau III.3 — Energies relatives $HF(SkM^*)+BCS(G)$ et $HF(SkM^*)+BCS(\delta)$ (en MeV) de la première barrière, du minimum SD et de la deuxième barrière par rapport à l'énergie du minimum ND pour cinq noyaux : ^{250}Cf , ^{252}Cf , ^{256}Fm , ^{260}Fm et ^{254}No . Elles sont calculées sans et avec correction rotationnelle.

Noyau		E_A		E_{II}		E_B	
		sans	avec	sans	avec	sans	avec
^{250}Cf	G	10.3	9.2	1.7	0.1	8.5	5.8
	δ	9.4	8.7	1.8	0.5	6.7	4.8
^{252}Cf	G	10.1	9.1	1.3	-0.3	6.0	3.7
	δ	9.2	8.5	1.3	0.0	6.4	4.6
^{256}Fm	G	9.3	8.3	0.3	-1.1	2.5	0.1
	δ	8.4	7.7	0.2	-1.2	2.7	0.6
^{260}Fm	G	8.7	7.4				
	δ	7.2	6.4				
^{254}No	G	9.6	8.6	0.4	-1.4	4.7	2.2
	δ	8.5	7.8	0.1	-1.3	2.3	0.5

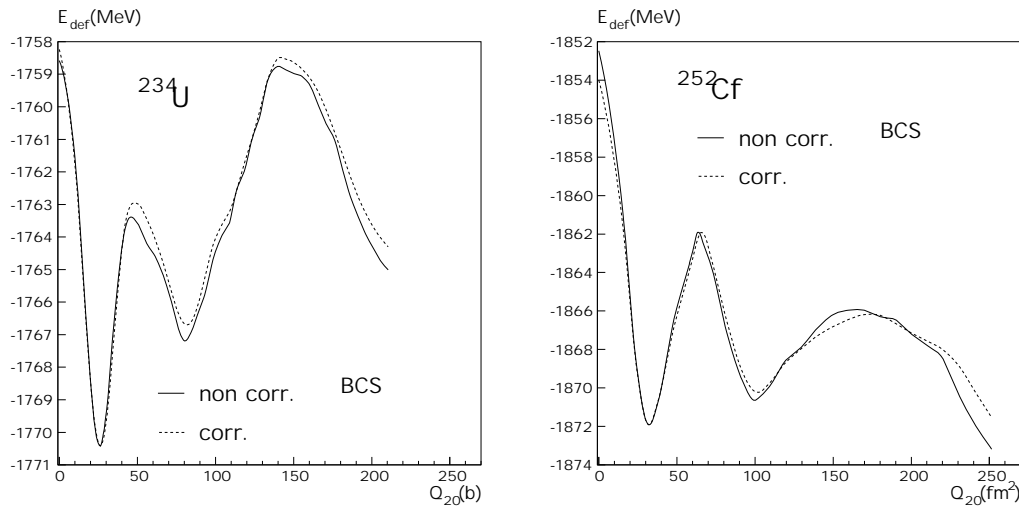


Figure III.14 — Courbes d'énergie de déformation en fonction de Q_{20} avec (tirets) et sans (trait plein) correction approchée de la dépendance en déformation de l'interaction d'appariement pour l' ^{234}U (à gauche) et le ^{252}Cf (à droite).

Tableau III.4 — Hauteurs de barrière E_A et E_B avec (corr.) ou sans (non corr.) correction de la dépendance en déformation pour l' ^{234}U et le ^{252}Cf (voir conditions de calculs dans le texte).

Noyau	$E_A(\text{MeV})$		$E_{II}(\text{MeV})$		$E_B(\text{MeV})$	
	non corr.	corr.	non corr.	corr.	non corr.	corr.
^{234}U	6.8	7.4	3.2	3.7	11.7	11.9
^{252}Cf	10.0	10.0	1.3	1.7	6.0	5.7

CHAPITRE IV

Résultats des calculs HTDA de barrières de fission

Afin de tester l'influence de la non conservation du nombre de particules sur les barrières de fission, nous avons procédé à des calculs d'énergie de déformation en traitant l'appariement dans l'approche HTDA(δ) pour deux noyaux, l' ^{234}U et le ^{252}Cf . Dans ces calculs, nous avons imposé les symétries axiale et de réflexion et nous avons tenu compte de la dépendance indirecte de la force d'appariement dans la solution (Cf. section I.5 du chapitre I), mais pas de la correction due au mouvement rotationnel de point-zéro.

IV.1 Comparaison entre HTDA et BCS sans correction de la dépendance en déformation

Tout d'abord, intéressons-nous aux résultats des calculs n'ayant pas fait l'objet du traitement de la section I.5. Comme le montre la figure IV.1 (courbes en trait plein), l'allure des courbes obtenues dans le formalisme HTDA est comparable à celle que fournit l'approche HF+BCS. Toutefois, la courbe obtenue par HTDA s'avère moins régulière, avec en particulier une structure qui s'apparente à un troisième minimum dans le ^{252}Cf , comme celui trouvé dans les calculs HF(SkM*)+BCS(δ). Par conséquent, il semble que ce soit la force d'appariement δ qui en soit responsable dans le cas de l'approximation HTDA. Un calcul utilisant ce formalisme avec la force de séniorité permettrait probablement de le confirmer.

Pour chacune des trois énergies relatives pertinentes (E_A , E_{II} et E_B), les résultats trouvés dans les deux formalismes ont été reportés dans le tableau IV.2. En les comparant, on s'aperçoit que l'on peut déduire une différence entre BCS et HTDA concernant leur comportement en fonction de la densité de niveaux des états individuels. En effet, les corrélations d'appariement varient en sens contraire des effets de couche avec la déformation car là où la densité de niveaux est faible, ces derniers sont forts et les corrélations

d'appariement peu importantes, le contraire prévalant pour les régions de forte densité. De telles régions se rencontrent au sommet des barrières, les minima locaux correspon-

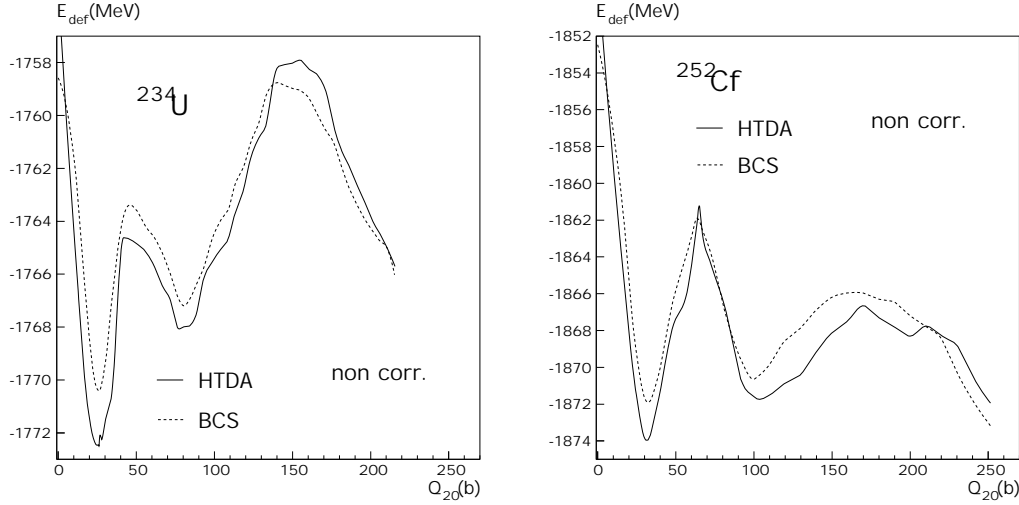


Figure IV.1 — Courbes d'énergies de déformation de l' ^{234}U (partie gauche) et du ^{252}Cf (partie droite) obtenues dans les formalismes HTDA(δ) (trait plein) et HF+BCS(G) (tirets) sans le traitement de la dépendance en déformation de l'appariement ni la correction rotationnelle, dans le cas de solutions symétriques de révolution et de réflexion.

Tableau IV.1 — Hauteurs E_A de la première et E_B de la deuxième barrière de fission et énergie relative du minimum SD par rapport au minimum ND obtenues dans les conditions de calcul précisées dans la légende de la figure IV.2 pour les deux traitements de l'appariement (HTDA(δ) et BCS(G)).

Noyau		$E_A(\text{MeV})$		$E_{II}(\text{MeV})$		$E_B(\text{MeV})$	
		BCS	HTDA	BCS	HTDA	BCS	HTDA
^{234}U	non corr.	6.8	7.8	3.2	4.4	11.7	14.5
	corr.	7.4	7.7	3.7	3.8	11.9	13.4
^{252}Cf	non corr.	10.0	12.7	1.3	2.2	6.0	7.3
	corr.	10.0	11.0	1.7	1.6	5.7	7.5

dant à des densités de niveaux plus faibles. Par ailleurs, les corrélations d'appariement contribuent à l'énergie totale du noyau par un terme négatif (cela est dû au fait qu'elles sont attractives), elles font donc baisser celle-ci par rapport à un calcul sans corrélations. Comme elles la diminuent davantage dans les zones de forte densité de niveaux, on en déduit que les énergies relatives calculées avec appariement sont inférieures à celles calculées sans appariement. Or les écarts entre les traitements BCS et HTDA de ces corrélations

sont en général plus grands aux sommets des barrières qu'au deuxième minimum local (SD), pour un noyau donné. Par conséquent, il semble que l'approximation HTDA corrèle en général moins que BCS dans les zones de forte densité de niveaux individuels.

IV.2 Effet de la dépendance en déformation de l'appariement

Passons maintenant aux résultats des calculs HTDA effectués dans les mêmes conditions de symétrie que précédemment mais en tenant compte cette fois-ci de la dépendance en déformation de l'appariement. Les courbes d'énergie en fonction de Q_{20} correspondantes ont été tracées en tirets sur la figure IV.2 pour les deux mêmes noyaux (^{234}U et ^{252}Cf), avec celles sans traitement de la dépendance étudiée ici (en trait plein). Ce dernier a un effet très net de lissage, plus prononcé ici que dans le formalisme BCS (voir la figure III.14), qui permet même de faire disparaître le troisième minimum dans le ^{252}Cf . Cela semble accréditer l'idée selon laquelle la présence de ce minimum dans la courbe en trait plein de la figure IV.1 est due à la sélection, variable avec la déformation, des états individuels soumis à l'appariement (niveaux entrant et/ou sortant de la fenêtre d'excitation), induisant des variations notables de l'énergie d'appariement (se reporter à l'argumentation de la section III.4). Notons également que ce traitement adoucit considérablement le sommet très pointu de la première barrière de fission du ^{252}Cf (voir la partie droite de la figure IV.2), siège d'une forte densité de niveaux avec très probablement des croisements et des variations d'espace de valence de l'appariement importants.

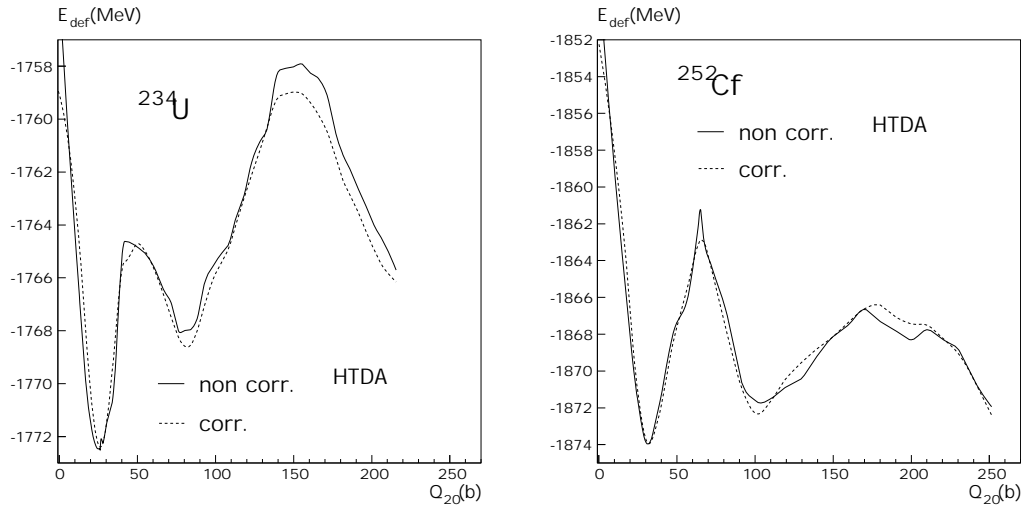


Figure IV.2 — Courbes d'énergie de déformation obtenues dans les formalismes HTDA(δ) avec (trait plein) et sans (tirets) traitement de la dépendance en déformation de l'appariement et sans la correction rotationnelle, pour l' ^{234}U (partie gauche) et le ^{252}Cf (partie droite).

En outre, les hauteurs des barrières et l'énergie de l'état isomérique SD sont différemment modifiées selon le noyau considéré, toujours dans le sens d'une diminution de ces quantités comme le montre le tableau IV.2, contrairement au cas BCS où notre traitement

Tableau IV.2 — Hauteurs E_A de la première et E_B de la deuxième barrière de fission et énergie relative du minimum SD par rapport au minimum ND obtenues dans les conditions de calcul précisées dans la légende de la figure IV.2 pour les deux traitements de l'appariement ($HTDA(\delta)$ et $BCS(G)$).

Noyau		$E_A(\text{MeV})$		$E_{II}(\text{MeV})$		$E_B(\text{MeV})$	
		BCS	HTDA	BCS	HTDA	BCS	HTDA
^{234}U	non corr.	6.8	7.8	3.2	4.4	11.7	14.5
	corr.	7.4	7.7	3.7	3.8	11.9	13.4
^{252}Cf	non corr.	10.0	12.7	1.3	2.2	6.0	7.3
	corr.	10.0	11.0	1.7	1.6	5.7	7.5

de la dépendance en déformation augmente de manière générale les énergies relatives. Dans l'isotope d'Uranium étudié, l'effet de ce traitement dans le formalisme HTDA croît avec Q_{20} alors que l'on observe le comportement inverse pour l'isotope de Californium considéré. Après correction approchée de la dépendance en déformation, les valeurs de E_A , E_{II} et E_B dans les deux formalismes deviennent comparables puisqu'elles diffèrent d'au plus 1.5 MeV.

Par conséquent, on peut conclure que notre traitement approché de la dépendance en déformation de l'appariement dans le cadre de l'approximation HTDA apporte une amélioration puisqu'il permet d'estomper certaines variations non physiques de l'énergie. Il permet aussi au formalisme HTDA de fournir des barrières de fission raisonnables compte tenu des symétries imposées. Dans une étude plus élaborée, il conviendrait de briser la symétrie axiale au voisinage de la première barrière et la symétrie de réflexion au niveau de la seconde barrière, comme cela a été fait dans l'approche HF+BCS, puis de projeter sur la parité positive. Il serait par ailleurs intéressant de vérifier si les minima hyperdéformés des isotopes $^{230,232}\text{Th}$ obtenus dans un calcul HF+BCS(G) asymétrique gauche-droite sont reproduits dans un calcul HTDA(δ) et, si tel est le cas, de voir s'il subsistent après le traitement de la dépendance en déformation. En ce qui concerne les corrélations, le formalisme HTDA offre un cadre naturel d'étude de celles de type RPA, permettant ainsi d'étudier l'effet du mouvement vibrationnel de point-zéro en fonction de la déformation.

Deuxième partie

SPIN DES FRAGMENTS DE FISSION

CHAPITRE V

Calculs de configurations de scission

Avant de pouvoir appliquer le modèle de génération de moment angulaire mettant en œuvre le mécanisme de pompage orientationnel, qui sera présenté dans le chapitre VI, nous devons obtenir des configurations de scission réalistes. L'objet de ce chapitre est de définir de telles configurations et d'en présenter une méthode de calcul, ce qui nécessite au préalable de déterminer le « paysage » énergétique au-delà de la deuxième barrière de fission. Afin de tester la pertinence des configurations de scission que nous avons trouvées, une comparaison de la fragmentation la plus probable issue de nos calculs avec celle extraite des distributions de masse expérimentales sera ensuite discutée.

V.1 Surface d'énergie potentielle de déformation au-delà de la 2^{ème} barrière de fission

Pour étudier la surface d'énergie potentielle au-delà du deuxième point-selle, on effectue des calculs avec contraintes sur trois moments multipôlaire essentiellement. En se limitant à des formes possédant la symétrie axiale, il s'agit du moment quadrupolaire Q_{20} , du moment octupolaire Q_{30} , et du moment hexadécapolaire Q_{40} (voir le paragraphe I.3 a du chapitre I pour leur signification géométrique). Au-delà d'une certaine élongation (environ 220 b pour le ^{252}Cf pris comme exemple dans ce travail), pour une valeur de Q_{20} fixée, un calcul sans contrainte sur Q_{40} et laissant l'asymétrie gauche-droite libre peut fournir au minimum deux solutions variationnelles. Elles correspondent donc à deux minima locaux dans l'espace des moments multipôlaire axiaux (autres que l'élongation Q_{20}) et elles peuvent être distinguées par des valeurs différentes de la striction Q_{40} . Autrement dit deux vallées se forment dans le plan (Q_{20}, Q_{40}) dont le fond est représenté sur la figure V.1.

Dans la vallée associée aux plus faibles valeurs de Q_{40} , la densité à un corps dans l'espace des coordonnées $\rho(\mathbf{r})$ a un support non connexe dans \mathbb{R}^3 : elle ne prend des valeurs significativement non nulles que dans deux régions disjointes de l'espace, symétriques de révolution autour de l'axe (Oz) comme nous l'avons imposé. Le noyau fissionnant est donc

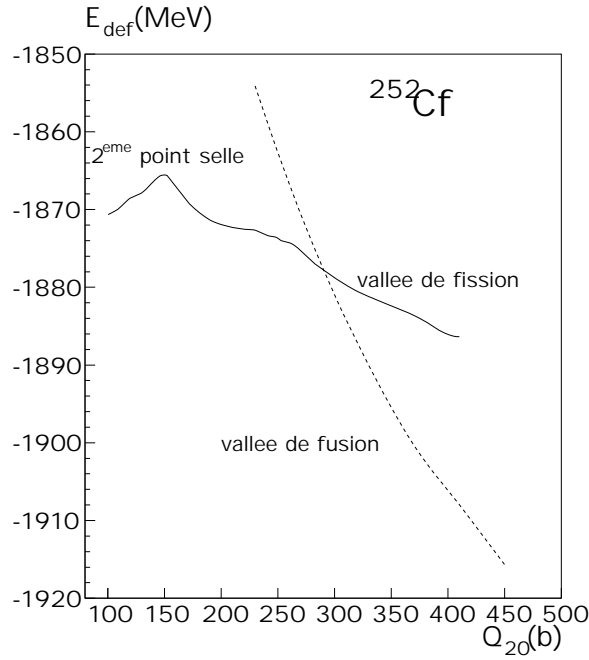


Figure V.1 — Vallées de fission et de fusion dans le ^{252}Cf , obtenues par des calculs brisant la symétrie de réflexion et sans correction rotationnelle avec une taille de base $N_0 = 16$. Tout au long de la vallée de fusion, les paramètres de base retenus sont $b = 0.42\text{fm}^{-1}$ et $q = 2.80$, tandis que pour la vallée de fission, les paramètres utilisés sont ceux obtenus par optimisation avec $N_0 = 14$.

scindé en deux fragments : cette vallée est appelée « vallée de fusion ». Dans l'autre vallée, associée aux plus grandes valeurs de Q_{40} , le noyau possède une forme connexe très allongée : c'est la « vallée de fission ». Ces deux vallées sont séparées par une crête (appelée barrière de scission par J.-F. Berger *et al.* [35]) et leurs profondeurs varient différemment avec l'élongation. C'est au fond de la vallée de fusion que la pente est la plus forte (variation en $Q_{20}^{-1/2}$ car seule la force coulombienne intervient dans l'énergie d'interaction mutuelle lorsque les fragments sont assez éloignés). Si l'on remonte cette vallée, c'est-à-dire pour des valeurs décroissantes de Q_{20} et des valeurs de Q_{40} assurant d'avoir toujours deux fragments séparés, ces derniers se rapprochent, se « touchent » et finissent par ne former qu'un seul noyau (voir figure V.2 colonne de droite, de bas en haut) : il n'existe alors plus qu'une seule solution correspondant à la vallée de fission. De même en descendant cette dernière, la crête la séparant de la vallée de fusion s'abaisse et finit par disparaître pour ne laisser qu'une seule solution à Q_{20} fixé : celle correspondant à deux fragments disjoints.

Il convient de noter que cette topologie a déjà été prédite notamment par les calculs micro-macroscopiques de P. Möller *et al.* [103] puis par ceux de J.-F. Berger *et al.* [34, 35] dans l'approche Hartree-Fock-Bogoliubov utilisant la force de Gogny (à la fois pour le champ moyen et pour les corrélations d'appariement). Toutefois, les calculs de P. Möller *et al.* tiennent compte de cinq degrés de liberté pour décrire les formes possibles du système fissionnant et explorent tout l'espace de déformation accessible dans la paramétrisation associée pour déterminer les minima locaux (dans un espace à cinq dimensions) [104]. Le paysage énergétique apparaît alors plus riche et plus complexe que celui révélé par une

approche variationnelle, même microscopique, dans un espace de déformation associé aux seules contraintes sur deux moments multipôlaire à la fois (comme dans le travail de J.-F. Berger *et al.* et le nôtre). Nous restons donc prudents sur l'interprétation de la surface d'énergie potentielle de déformation au-delà de l'existence des deux solutions, à Q_{20} fixé, discutées ci-dessus.

Les formes que prend le noyau dans la vallée de fission et celles des fragments dans la vallée de fusion sont représentées sur la figure V.2. On constate que, dans la vallée de

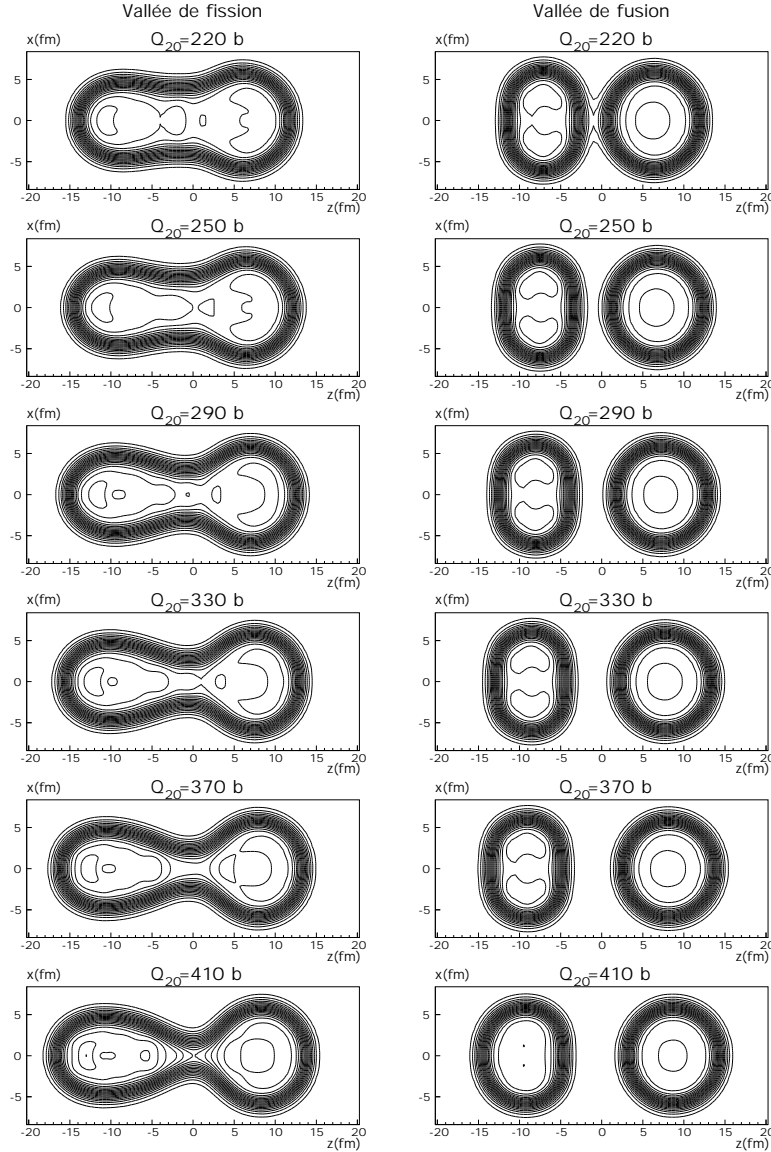


Figure V.2 — Contours de densité nucléaire totale (neutrons+protons) dans les vallées de fission et de fusion du noyau fissonnant ^{252}Cf .

fission, le pré-fragment léger (à gauche) est allongé (prolate, $Q_{20} > 0$) alors que, dans la vallée de fusion, le fragment primaire léger est aplati (oblate, $Q_{20} < 0$). Dans les deux cas, le fragment lourd est quasiment sphérique ($Q_{20} \approx 0$).

V.2 Configurations de scission

Maintenant que nous avons une idée du paysage énergétique au-delà du deuxième point-selle, localisons plus précisément la scission et définissons ce que l'on entendra ici par configuration de scission.

V.2 a Définition et caractérisation

Tout d'abord, nous définissons l'interdistance d entre deux fragments comme la distance minimale entre les points sur l'axe z à mi-hauteur de la densité nucléaire de chaque fragment. Cela suppose que la courbe de variation de la densité sur l'axe z présente un minimum local situé entre deux maxima assez larges valant approximativement la densité de la matière nucléaire infinie (0.16 fm^{-3} environ calculée avec la force SkM*) et que la hauteur de ce minimum soit inférieure à la moitié de celle des deux maxima. C'est la situation représentée sur la partie inférieure de la figure V.3. Dans ce cadre, ce que nous appelons configuration de scission dans ce travail est une configuration correspondant à deux fragments dont les bords diffus en vis à vis sont séparés par une interdistance d à partir de laquelle l'interaction nucléaire forte entre deux nucléons situés chacun dans un fragment devient négligeable devant l'interaction coulombienne mutuelle. Cette interdistance minimale vaut donc environ le double de la portée de l'interaction nucléon-nucléon, qui est de l'ordre de 1 fm. Nous nous plaçons donc dans le cas où $d \geq 2 \text{ fm}$. Ainsi définie, une configuration de scission se trouve dans la vallée de fusion. Un exemple typique correspondant à cette définition est représenté sur la partie supérieure de la figure V.3. Ce point de vue pour définir la scission est adopté dans de nombreux autres modèles. Citons notamment le modèle moléculaire microscopique non autocohérent de W. Nörenberg décrivant la configuration de scission par un état BCS [105], le modèle du point de scission de B. D. Wilkins *et al.* fondé sur des effets de couches déformées [106], le « tip model » de la fission froide de F. Gönnenwein *et al.* dans lequel les fragments sont quasiment tangents et dans leur état fondamental [107], le modèle semi-microscopique de Ş. Mişicu et P. Quentin décrivant la structure nucléaire des fragments dans l'approche auto-cohérente Hartree-Fock avec corrélations d'appariement BCS et utilisant le potentiel de proximité pour l'interaction nucléaire entre les fragments [108], et pour finir, le modèle de fondé sur le concept DNS (« di-nuclear sytem ») (voir par exemple [109] et les références [8-20] incluses). En revanche, une configuration correspondant à notre définition est considérée comme une configuration de post-scission par d'autres auteurs. Par exemple, R. Vandenbosch définit une configuration de scission comme la configuration juste avant la rupture de l'étranglement [110]. C'est également le point de vue de P. Möller et A. Sierk pour qui l'image du contour de densité nucléaire à 410 b dans la vallée de fission sur la figure V.2 est la plus proche d'une configuration de scission [111] car elle correspond à des pré-fragments étirés (et non aplatis comme pour le contour d'iso-densité à 220 b dans la vallée de fusion). Il faudrait toutefois d'après eux que l'étranglement soit plus faible au point d'avoir deux fragments qui se « touchent », ce qui correspondrait en fait à la figure 5.B de la référence [35] représentant une configuration située sur la « ligne de scission » (définie comme l'ensemble des configurations de scission associées à différentes valeurs de Q_{20}). Nous avons également calculé et représenté une telle configuration sur la partie supérieure de la figure V.4, la partie inférieure montrant le profil de densité le long de l'axe de symétrie.

Outre la distance entre les fragments, essentiellement quatre autres paramètres carac-

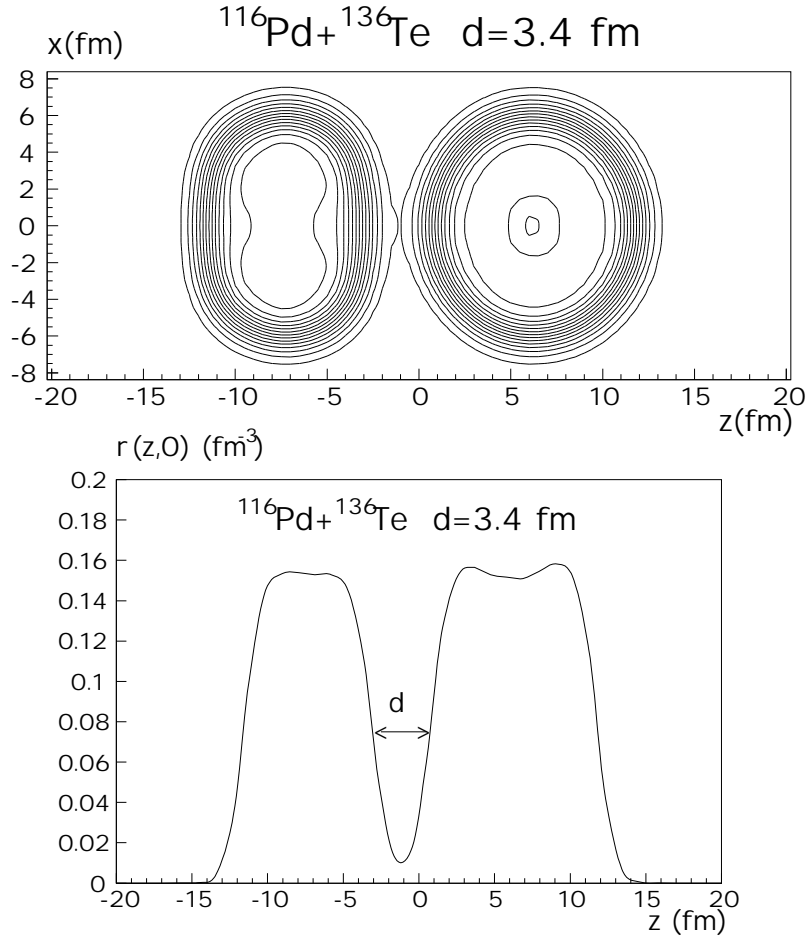


Figure V.3 — Exemple de configuration de scission du noyau fissionnant ²⁵²Cf.

térisent une configuration de scission : la masse A_2 et la charge Z_2 du fragment lourd (à droite par convention dans notre travail) par exemple (le fragment de gauche (A_1, Z_1) étant alors déterminé par $A_1 = A - A_2$ et $Z_1 = Z - Z_2$) ainsi que les moments quadrupôlares $Q_{20}^{(i)}$ de chaque fragment (supposés suffire à la description de leur forme), dont la définition est donnée dans l'annexe C.

V.2 b Obtention d'une configuration de scission désirée

Pour obtenir la fragmentation $(A, Z) \longrightarrow (A_1, Z_1) + (A_2, Z_2)$ où A_2 et Z_2 sont fixés, il est nécessaire d'effectuer un calcul avec une double contrainte satisfaisant simultanément aux deux conditions $\langle \hat{A} \rangle_2 = A_2$ et $\langle \hat{Z} \rangle_2 = Z_2$. Cela peut être réalisé grâce à l'algorithme suivant. On effectue des calculs contraints sous forme de deux balayages imbriqués en $\langle \hat{A} \rangle_2$ et $\langle \hat{Z} \rangle_2$ de façon à encadrer A_2 et, pour chaque contrainte sur $\langle \hat{A} \rangle_2$, à encadrer Z_2 . Etant donnée une valeur μ_A de la contrainte sur $\langle \hat{A} \rangle_2$, on effectue une interpolation de la contrainte $\mu_Z(\langle \hat{A} \rangle_2, \langle \hat{Z} \rangle_2)$ sur $\langle \hat{Z} \rangle_2$, tabulée aux points de calculs, afin de trouver la valeur $\mu_Z^*(\mu_A)$ de la contrainte sur $\langle \hat{Z} \rangle_2$ telle que $\langle \hat{Z} \rangle_2 = Z_2$. On répète ce procédé pour chaque

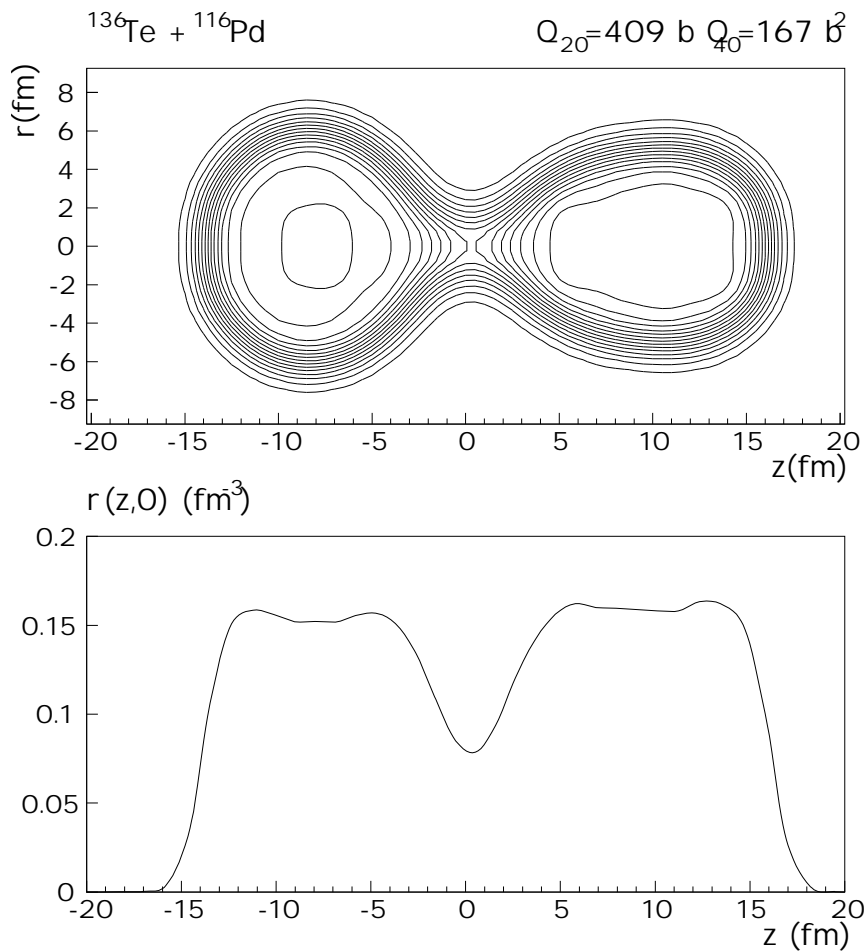


Figure V.4 — Exemple de configuration de scission du ^{252}Cf au sens de P. Möller et A. Sierk [111]. Ici, contrairement à la convention respectée dans le reste de ce travail, le pré-fragment lourd est à gauche.

valeur de la contrainte μ_A . On obtient donc sous forme tabulée une relation entre μ_Z^* et μ_A ainsi qu'une relation entre μ_A et $\langle \hat{A} \rangle_2$, que l'on interpole pour trouver la valeur μ_A^* qui donne $\langle \hat{A} \rangle_2 = A_2$. Enfin, on interpole la fonction μ_A pour obtenir le couple de contraintes (μ_A^*, μ_Z^*) conduisant aux deux conditions requises. En pratique, avec une grille 5×5 , nous sommes parvenus à des nombres de nucléons différant d'au plus 1 des valeurs désirées.

Pour obtenir la fragmentation souhaitée, il faut en plus de la double contrainte précédente pour obtenir la configuration de scission caractérisée par les moments multipolaires Q_{20} et Q_{40} . Les deux moments multipolaires font naturellement chacun l'objet d'une contrainte, mais, comme précédemment, il est impossible d'exprimer d comme la valeur moyenne d'un opérateur, ce qui empêche de faire dépendre d de façon explicite de Q_{20} et Q_{40} . Cependant, il est possible de faire dépendre d de fait toute contrainte explicite sur ce paramètre. On procède donc à la détermination de la configuration de scission en contraignant la distance entre les centres de masse, notée D , qui peut

s'exprimer comme une valeur moyenne puisque, d'après (C-24), il s'agit simplement de :

$$D = z_{C_2} - z_{C_1} = \langle z (F_\delta(z - z_M) - G_\delta(z - z_M)) \rangle. \quad (\text{V-1})$$

On suppose ensuite la bijectivité entre d et D à $Q_{20}^{(1)}$ et $Q_{20}^{(2)}$ fixés, ce qui autorise alors à ajuster D pour obtenir la valeur souhaitée de d . Par conséquent, les trois contraintes (au moins) ci-dessus sont nécessaires pour fixer d . Dans le cadre d'un modèle simple où les fragments sont assimilés à des ellipsoïdes co-axiaux [112, 113], on peut montrer qu'elles sont suffisantes. En effet, soient a_i et c_i les demi-axes perpendiculaires et parallèles à l'axe z du fragment i . On montre alors que la valeur moyenne du rayon carré $\langle \mathbf{r}^2 \rangle^{(i)}$ et le moment quadrupolaire $Q_{20}^{(i)}$ du fragment i s'écrivent :

$$\langle \mathbf{r}^2 \rangle^{(i)} = \frac{\int_{\mathcal{F}_i} d^3\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \mathbf{r}^2}{\int_{\mathcal{F}_i} d^3\mathbf{r} \rho(\mathbf{r})} = \frac{1}{5}(c_i^2 + 2a_i^2) \quad (\text{V-2})$$

$$Q_{20}^{(i)} = \int_{\mathcal{F}_i} d^3\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) (3z^2 - \mathbf{r}^2) = \frac{2}{5}A_i(c_i^2 - a_i^2). \quad (\text{V-3})$$

Dans ce modèle, l'interdistance prend alors la forme :

$$d = D - (c_1 + c_2), \quad (\text{V-4})$$

où les c_i se déduisent des expressions (V-2) et (V-3) dans lesquelles le moment quadrupolaire est contraint et l'opérateur \mathbf{r}^2 est laissé libre. Autrement dit, pour $Q_{20}^{(1)}$ et $Q_{20}^{(2)}$ fixés, $\langle \mathbf{r}^2 \rangle^{(1)}$ et $\langle \mathbf{r}^2 \rangle^{(2)}$ prennent chacun les valeurs qui minimisent l'énergie de déformation (supposées uniques), donc sont fixés aussi : les c_i sont ainsi déterminés par la donnée des $Q_{20}^{(i)}$. Il est par conséquent suffisant d'imposer la distance entre les centres de masse des fragments D ainsi que leurs moments quadrupolaires $Q_{20}^{(i)}$ pour fixer l'interdistance d .

V.3 Fragmentation la plus probable

Une fois définie ce que l'on entend par configuration de scission dans ce travail et une fois établie la procédure à suivre pour obtenir une configuration souhaitée, nous voulons tester la pertinence de nos configurations de scission. Pour cela, nous nous intéressons plus particulièrement à la question de savoir quelle fragmentation primaire est la plus probable parmi toutes celles que peut explorer le noyau. Afin de répondre à cette question, il conviendrait de considérer l'aspect dynamique du problème, par exemple dans une approche de type GCM (Generating Coordinate Method), que J.-F. Berger *et al.* ont appliquée à la fission du ^{240}Pu [34, 35]¹. Comme nos calculs sont statiques, l'hypothèse la plus raisonnable que nous puissions faire est de supposer que la fragmentation la plus probable est celle qui minimise l'énergie de déformation du système fissionnant pour une élongation Q_{20} fixée correspondant à une configuration de scission (au sens où nous l'entendons). C'est d'ailleurs un aspect de l'hypothèse avancée par B. D. Wilkins *et al.* pour calculer les distributions de masse des fragments de fission [106]. Dans une configuration

¹Ces auteurs ont toutefois développé la fonction d'onde du noyau sur un ensemble continu de déterminants de Slater correspondant uniquement aux paramètres de contraintes Q_{20} et Q_{40} , imposant donc l'asymétrie de masse. Pour rendre compte des distributions de masse, il faudrait en plus inclure des déterminants de Slater ayant différentes valeurs de Q_{30} .

de scission ci-dessus définie, les fragments étant bien séparés (mais proches), il est peu probable d'observer des transferts de nucléons entre fragments à ce stade du processus de fission. Autrement dit, à mesure que l'on augmente l'interdistance d à partir d'une configuration de scission et en omettant l'évaporation de neutrons et/ou de particules chargées, chaque fragment conserve les mêmes nombres de neutrons et de protons : la fragmentation primaire ne varie donc pas. On peut alors se placer à des interdistances d supérieures à celles correspondant à une configuration de scission pour calculer l'énergie $E(A_2)$ de la fragmentation (A_1, A_2) , où par convention A_2 désigne la masse du fragment lourd, le moment quadropolaire total étant fixé et le nombre de protons (donc de neutrons aussi) étant laissé libre de s'ajuster à sa valeur minimisant l'énergie $E(A_2)$. Procédant ainsi, nous ne cherchons que la masse du fragment lourd rendant l'énergie de configuration minimale.

Les courbes d'énergie de configuration $E(A_2)$ de neuf noyaux ont été obtenues et représentées sur les figures V.5 à V.9. Elles admettent toutes un minimum en accord avec la nature de la distribution de masse expérimentale. En effet, la valeur de A_2 qui minimise E pour tous les noyaux considérés sauf le ^{258}Fm et le ^{258}No est différente de $A/2$ (A étant la masse totale), ce que l'on interprète par une distribution de masse asymétrique. C'est effectivement le cas comme le montrent les distributions expérimentales pour l' ^{236}U et le ^{240}Pu sur la figure V.5 ainsi que pour le ^{244}Cm et le ^{252}Cf sur la figure V.7. Dans le cas du ^{258}Fm et du ^{258}No , nous trouvons un minimum correspondant à la masse moitié ($A_2 = 129$) (voir figure V.8), ce qui caractérise une distribution de masse de forme symétrique. Expérimentalement, Hulet *et al.* ont trouvé une telle distribution [114]. De plus, on constate que les valeurs de A_2 minimisant l'énergie totale restent quasiment constantes en fonction de la masse A du système fissionnant. Qualitativement, ce résultat est en accord avec le fait expérimentalement établi que la masse moyenne des fragments lourds issus de la fission d'un noyau de masse donnée A ne dépend quasiment pas de celle-ci (voir la figure V.10). Sur le plan quantitatif, notre valeur de la masse la plus probable, $A_2=134$, est en très bon accord avec celle du maximum de la distribution expérimentale pour le l' ^{236}U , le ^{240}Pu et le ^{244}Cm , tandis que pour le ^{252}Cf , l'accord est moins satisfaisant puisque nous sous-estimons la valeur expérimentale d'environ 6 nucléons. Cela est peut être dû à la non conservation du nombre de particules dans l'approximation BCS, mais aussi au fait que la fonction d'onde d'un noyau fissionnant ayant les bons nombres totaux de protons Z et de neutrons N est la superposition de différentes fragmentations $(N_1, Z_1) + (N_2, Z_2)$ telles que $N_1 + N_2 = N$ et $Z_1 + Z_2 = Z$. Cela est a fortiori vrai pour un état BCS qui est la somme de déterminants de Slater avec différents nombres de nucléons.

Un aspect de l'allure de nos courbes d'énergie n'a pas encore été discuté : l'existence d'un second minimum. Très net dans le cas du ^{250}Fm et du ^{252}Cf (voir figures V.9 et V.7 respectivement), il correspond à une fragmentation très asymétrique. Pour ce noyau, il est observé pour $A_2 \approx 170$ et a été obtenu en relâchant la contrainte sur l'opérateur \hat{A}_2 dans le deuxième puits (le plus asymétrique). Son existence est une manifestation d'effets de couche déformés, prédits notamment par Wilkins *et al.* [106], responsables de l'épaulement observé par G. Barreau *et al.* [116] dans la distribution de masse expérimentale du ^{252}Cf en fission spontanée pour une masse du fragment lourd voisine de 176 comme le montre la figure V.6, en dépit des résultats négatifs obtenus par Hambsch et Oberstedt dans cette même région [117]. L'écart de 6 nucléons entre notre minimum et cet épaulement est probablement dû aux mêmes raisons que celles expliquant une différence similaire pour le premier minimum. Il est intéressant enfin de noter que le fragment léger correspondant possède une masse voisine de 70 et que des mesures récentes de distributions de masse des

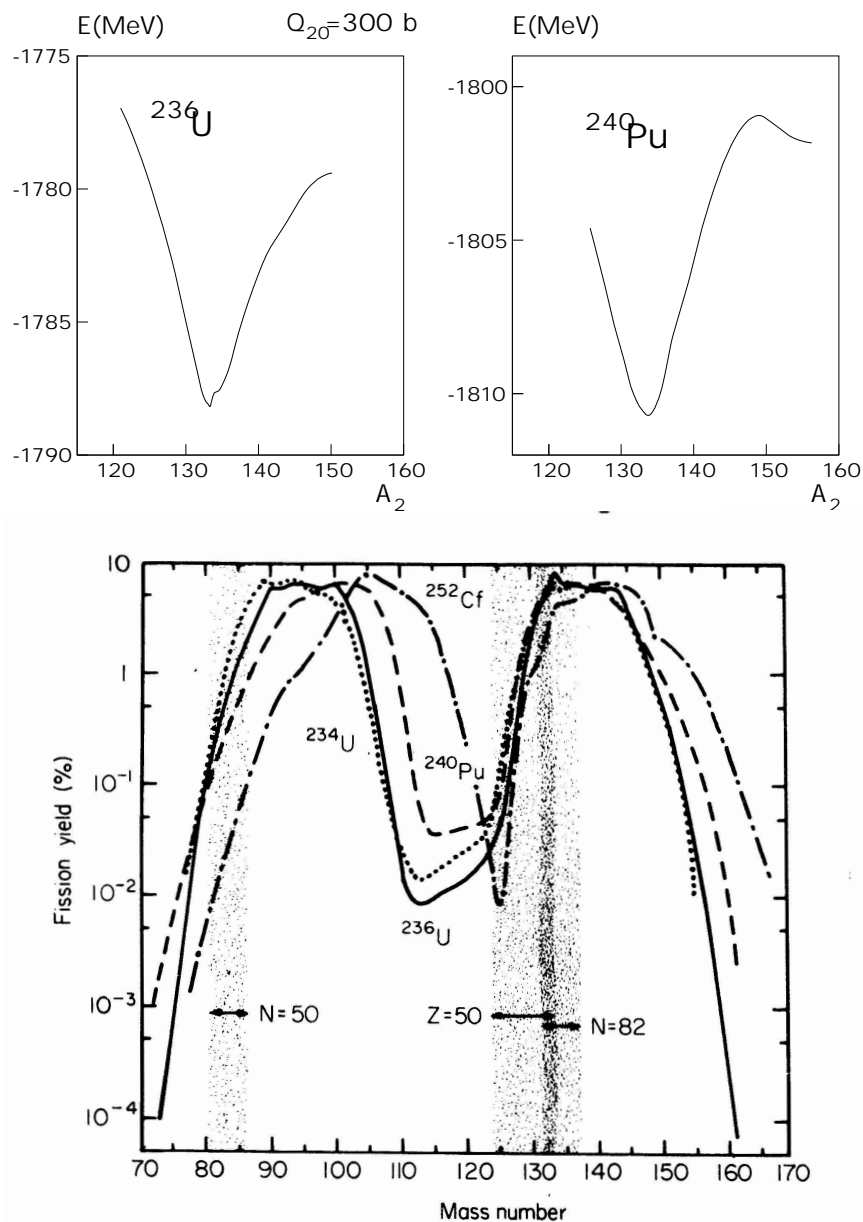


Figure V.5 — *Partie supérieure : courbes d'énergie de configuration en fonction de la masse du fragment lourd pour l' ^{236}U et le ^{240}Pu . Partie inférieure : distributions de masse expérimentales en fission induite par neutrons thermiques pour l' ^{236}U et en fission spontanée pour le ^{240}Pu extraites de [115].*

fragments de fission induite par neutrons thermiques, effectuées auprès du séparateur en masse de fragments LOHENGRIN par I. Tsekhanovich et collaborateurs pour le ^{238}Np [118] et par D. Rochman *et al.* pour le ^{245}Cm [119], révèlent un épaulement autour de la masse 70, dû à la proximité de $Z=28$ dans le fragment léger.

Pour finir ce chapitre, abordons un problème passé généralement sous silence et soulevé par l'utilisation de la force de séniorité dans l'approximation BCS. En effet, dans la description d'une configuration de scission ou au-delà, certains éléments de matrice de la

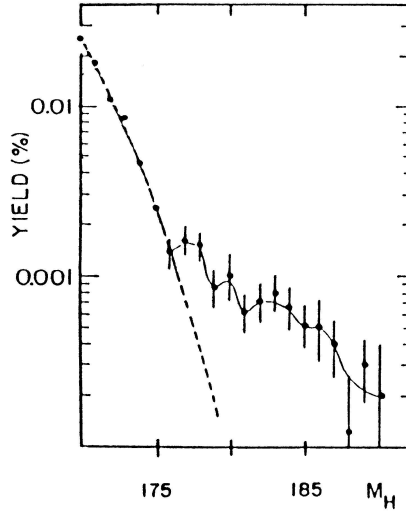


Figure V.6 — *Distribution de masse expérimentale (avant émission de neutrons) dans la fission spontanée du ^{252}Cf pour des fragmentations très asymétriques [116]. La masse du fragment lourd est ici notée M_H .*

forme $\langle i\bar{i}|\hat{V}_G|j\bar{j}\rangle$ où la fonction d'onde de l'état $|i\rangle$ est localisée dans le fragment de gauche et celle de $|j\rangle$ dans le fragment de droite par exemple, sont non nuls. Cela conduit à surévaluer l'énergie d'appariement. Toutefois, en supprimant la contribution non physique de ces termes, on devrait, pour évaluer correctement les éléments de matrice de cette interaction d'appariement, utiliser l'expression (I-70) avec le nombre de nucléons dans le fragment et la même valeur de G_q , donc augmenter g_q et par suite, l'énergie d'appariement. Ces deux effets agissent ainsi en sens contraire. Si l'on fait l'approximation qu'ils se compensent, le résultat de notre calcul redevient alors raisonnable. Dans son modèle de scission, W. Nörenberg a explicitement tenu compte du problème posé par le recouvrement nul ou faible des fonctions d'onde individuelles en écrivant l'interaction d'appariement sous la forme approchée [105] :

$$\langle i\bar{i}|\hat{V}_G|\tilde{j}\bar{j}\rangle = - \sum_{F=1}^2 G_F w_i^F w_j^F \quad (\text{V-5})$$

où G_F est l'intensité pour le fragment F (choisie inversement proportionnelle à la masse du fragment) et w_i^F la probabilité que le nucléon dans l'état $|i\rangle$ appartienne au fragment F . Par conséquent l'élément de matrice (V-5) s'annule si les états $|i\rangle$ et $|j\rangle$ sont localisés dans des fragments différents sans recouvrement. Cependant, le problème de l'intensité de la force demeure car G_F conserve sa valeur quel que soit ce recouvrement. Mentionnons aussi les travaux récents de Krappe et Fadeev [120] qui ont développé un formalisme effectuant une projection de l'état BCS du système total sur le nombre de particules dans chaque fragment. Les états ainsi construits sont ensuite utilisés dans un calcul de type coordonnée génératrice afin de décrire la transition continue des corrélations d'appariement d'un système compact avec un gap d'appariement et un potentiel chimique (par type de nucléons) à deux systèmes séparés avec leurs propres corrélations. Néanmoins, ils gardent la même intensité de la force de séniorité au cours de cette transition.

On peut ainsi conclure que notre description des configurations de scission et de post-scission reste globalement satisfaisante dans une région de masse assez étendue au-delà des actinides. Cela nous permet donc d'utiliser l'approche décrite dans ce chapitre pour déterminer des configurations réalistes dans lesquelles nous allons mettre en œuvre le mécanisme de pompage de orientationnel dans le cadre des approximations présentées dans le chapitre VI qui suit.

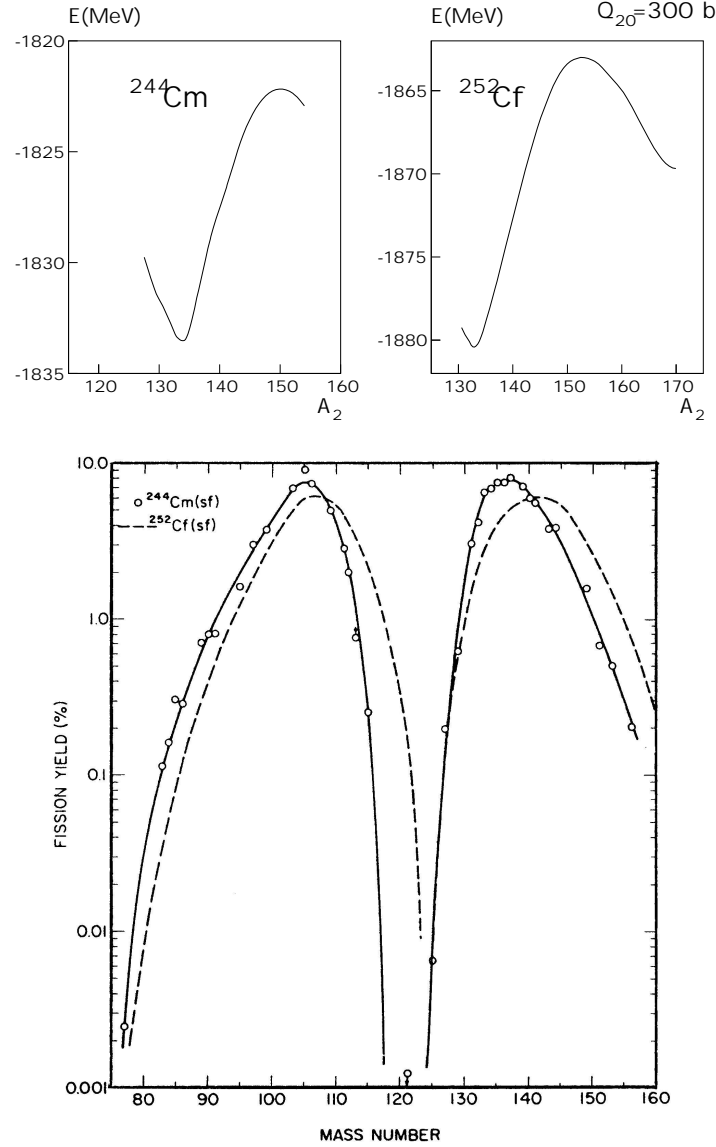


Figure V.7 — Identique à la figure V.5 pour le ^{244}Cm et le ^{252}Cf . Les distributions expérimentales, en fission spontanée toutes les deux, proviennent de [121].

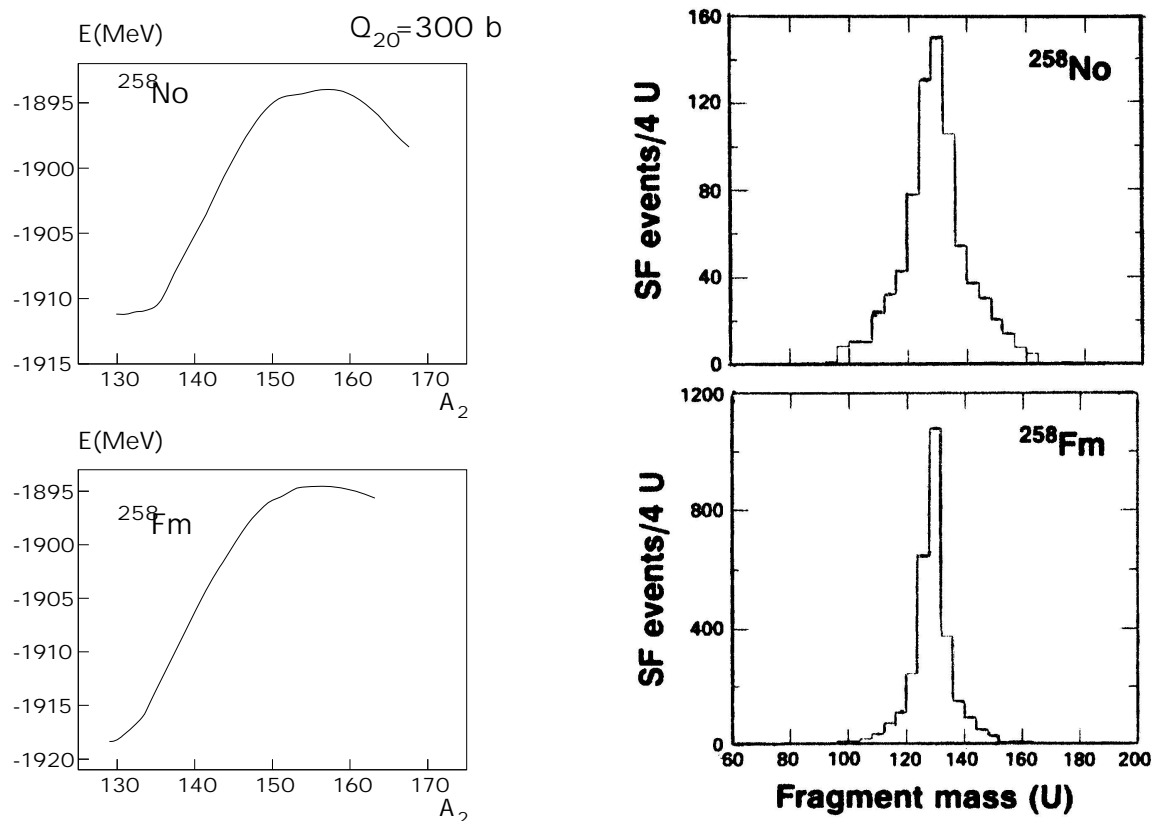


Figure V.8 — *Partie gauche : identique à la partie supérieure de la figure V.5 pour le ^{258}Fm et le ^{258}No . Partie droite : distributions expérimentales en fission spontanée du ^{258}Fm et du ^{258}No respectivement, extraites de [114].*

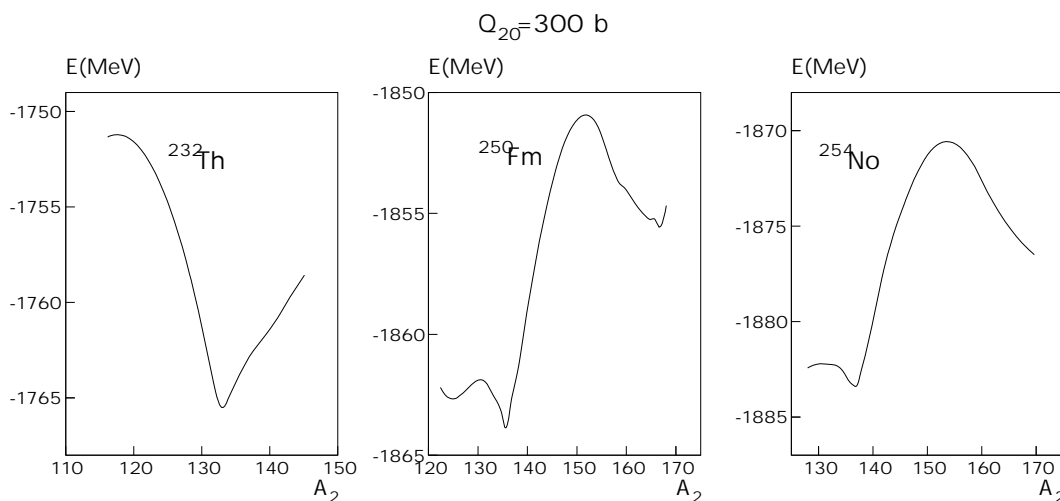


Figure V.9 — *Identique à la partie supérieure de la figure V.5 pour le ^{232}Th , le ^{250}Fm et le ^{254}No .*

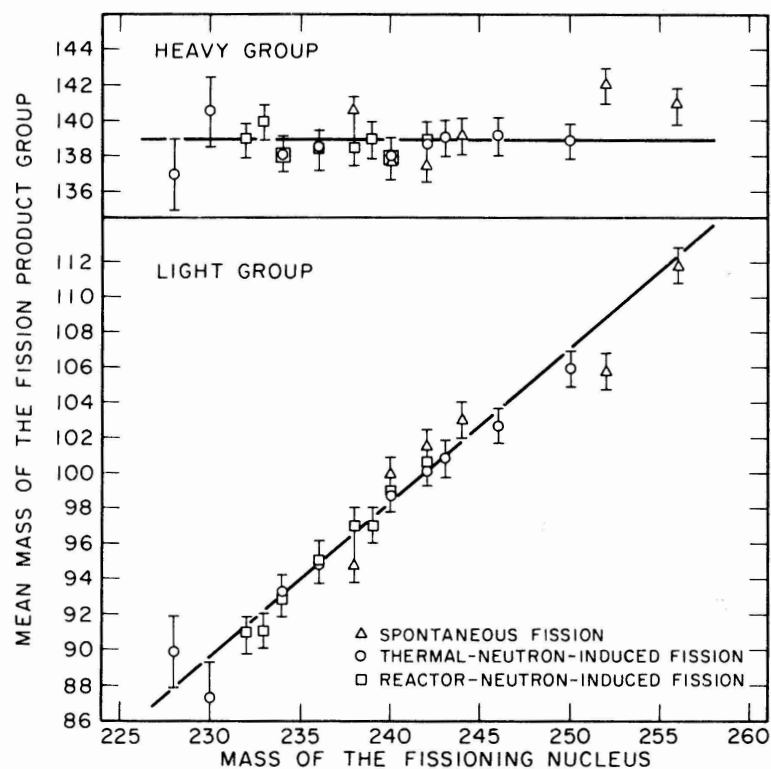
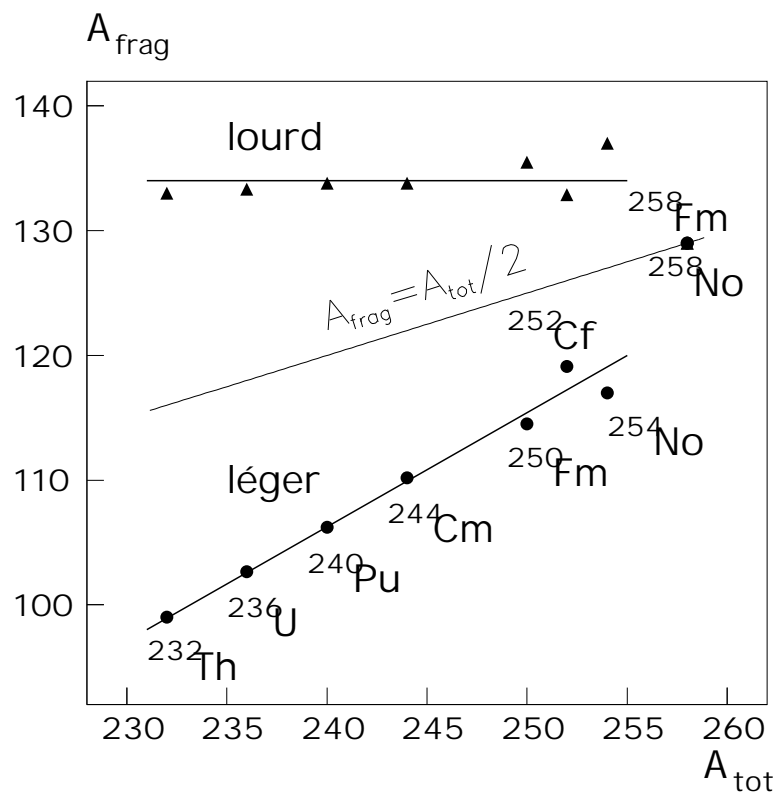


Figure V.10 — *Partie supérieure : variation des masses les plus probables du fragment lourd et du léger obtenues dans nos calculs en fonction de la masse A du système fissionnant. Partie inférieure : variation des masses moyennes des fragments lourd et léger en fonction de A (données expérimentales extraites de [122]).*

CHAPITRE VI

Mécanisme de pompage orientationnel ¹

VI.1 Introduction et motivation

Le problème du peuplement des états de spin assez élevé dans les fragments issus de la fission de noyaux lourds dans leur état fondamental ou dans un état peu excité constitue un problème encore largement ouvert. Les études expérimentales de ces dernières années mettent à l'épreuve les modèles alors disponibles et requièrent des efforts théoriques nouveaux pour comprendre le mécanisme de génération de moment angulaire à l'œuvre dans les fragments. Des mesures détaillées récentes de distribution de spin dans des paires de fragments résultant du même noyau composé [123] et des études de distribution angulaire des rayons γ de désexcitation des fragments dans la fission binaire ou ternaire du même noyau [124] ont jeté une ombre sur les théories disponibles jusque là [43–45, 125]. Celles-ci considèrent des sources dynamiques de génération de courants collectifs rotationnels à l'intérieur des fragments. Ces courants proviennent de l'activation thermique ou quantique de certains degrés de liberté collectifs à la scission. De nombreuses caractéristiques importantes de ce phénomène sont discutées de ce point de vue dans les références [126, 127]. Cependant, on trouve généralement que le mouvement collectif vibrationnel de point-zéro ne suffit pas à décrire correctement le moment angulaire moyen des fragments. La « température » T requise pour expliquer même approximativement les données se révèle trop élevée par rapport à celle mesurant l'énergie d'excitation statistique attendue. En effet, les auteurs des références [44, 123] ne parviennent à approcher les valeurs expérimentales qu'avec $T \approx 2 - 3$ MeV, ce qui correspond à une énergie d'excitation statistique $E_{\text{stat}} \geq 50$ MeV. Ces modèles sont aussi dans l'incapacité de rendre compte de la chute du moment angulaire (jusqu'à $2 - 3 \hbar$) dans certaines paires de fragments et de sa variation avec le nombre total de neutrons émis par le système fissionnant [47].

¹Ce chapitre s'est inspiré de la référence [48].

Selon les auteurs du mécanisme faisant l'objet de ce chapitre [48], les études théoriques précédentes ont omis une particularité importante du mouvement de rotation en mécanique quantique : le fait que l'état d'un système ayant une orientation bien définie dans l'espace est décrit par un paquet d'onde construit à partir d'états de moment angulaire non nul. A la scission (dans le sens du chapitre V), chaque fragment est supposé si fortement polarisé par le champ coulombien de son partenaire de fission qu'il est considéré « bien orienté » le long de l'axe de fission. L'état de chaque fragment est alors une superposition d'états rotationnels, comme l'ont montré il y a longtemps Peierls et Yoccoz [67]. Ce mécanisme a été dénommé pompage orientationnel. Le but de notre étude est de déterminer de façon approchée une telle décomposition en états de bon moment angulaire dans le processus de fission, dont on pourra ensuite déduire la valeur moyenne $\langle \hat{\mathbf{J}}_i^2 \rangle$ du carré du moment angulaire du fragment i dans l'état du système total puis le spin J_i de ce fragment grâce à la relation :

$$J_i(J_i + 1) = \langle \hat{\mathbf{J}}_i^2 \rangle. \quad (\text{VI-1})$$

VI.2 Hypothèses pour un point de vue minimal

Le mécanisme de pompage orientationnel repose donc sur l'idée que, à la scission, l'interaction coulombienne entre les fragments les polarisent mutuellement et donc les alignent suivant la direction de fission. Or, conformément au principe d'incertitude de Heisenberg, l'état quantique d'un système possédant une orientation bien définie dans un plan contenant la direction de fission est une superposition d'états propres de \hat{J}_x , où x indique une direction perpendiculaire à ce plan. Par conséquent la valeur moyenne de \hat{J}_x est non nulle, et celle de $\hat{\mathbf{J}}^2$ également. Afin de mettre en évidence l'ordre de grandeur de $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle$ que ce mécanisme est capable de fournir à lui seul, on néglige toute autre source de moment angulaire. Tout d'abord, en considérant la fission spontanée d'un noyau pair-pair depuis son état fondamental (qui est un état 0^+), on part d'un moment angulaire total nul, ce qui élimine toute contribution due à la rotation du noyau fissionnant (qui peut être provoquée par la collision avec un projectile par exemple, ou provenir de son spin initial non nul). De plus, on se place dans le cas où le moment orbital associé au mouvement relatif est nul, autrement dit on suppose que les deux fragments ne tournent pas autour de leur barycentre. Enfin, on néglige tout mode collectif engendrant du moment, tel que le mode de bending [43, 44] ou tout autre mode évoqué par Nix et Swiatecki [45]. D'après la première hypothèse et par conservation du moment angulaire et de la parité, le noyau pair-pair fissionnant depuis son état fondamental reste tout au long du processus dans un état propre de $\hat{\mathbf{J}}^2$ et de l'opérateur de parité $\hat{\Pi}$.

On considère l'étape de la fission où l'interaction nucléaire entre les fragments devient négligeable devant l'interaction coulombienne, c'est-à-dire la scission au sens où nous l'entendons (voir définition dans le paragraphe V.2 a du chapitre V). Chaque nucléon est alors localisé dans un des fragments, ce qui autorise à factoriser la fonction d'onde globale en produit des fonctions d'onde intrinsèques de chaque noyau fils et de celle du mouvement relatif. Cette dernière, étant associée à un moment angulaire orbital nul, est invariante par rotation dans l'espace : elle est purement radiale. Au regard de l'argument avancé dans la section V.3, la fonction d'onde du système total est dans notre description une combinaison linéaire d'états correspondant à des fragmentations différentes. Toutefois, pour pouvoir appliquer les idées ci-dessus et obtenir l'ordre de grandeur souhaité, nous ne considérons

qu'une seule composante de cette superposition, c'est-à-dire que nous nous intéressons à une fragmentation particulière. Par conséquent, l'état du système total prend la forme :

$$|\Psi\rangle = \hat{P}_0(|R\rangle \otimes |\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle) \quad (\text{VI-2})$$

où \hat{P}_0 est le projecteur sur le sous-espace des états de moment angulaire total nul, $|\Psi_i\rangle$ l'état caractérisant le fragment i et $|R\rangle$ l'état décrivant le mouvement relatif. Ce dernier étant invariant par rotation, il est « constant » par rapport aux opérateurs agissant seulement sur les angles. On suppose enfin que le processus de fission conserve une symétrie de révolution autour de l'axe z , confondu avec la direction dans laquelle les fragments s'éloignent l'un de l'autre. Les deux états $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ sont donc états propres de \hat{J}_z . Aucune autre hypothèse n'est faite sur la forme des fragments. Pour déterminer leurs états $|\Psi_i\rangle$, on décrit l'état intrinsèque du système total correspondant à une configuration de scission de façon approchée par un état BCS (comme dans le chapitre V) et on le projette sur les demi-espaces correspondant aux fragments gauche et droit suivant la procédure qui sera exposée dans le chapitre VII. Cela permet à chaque fragment d'adopter des formes axiales quelconques, en particulier asymétriques de réflexion dans leurs repères intrinsèques (ayant pour origine leurs centres de masse). Notons qu'en général la projection $|\Psi_i\rangle$ d'un état BCS n'est pas un état BCS.

VI.3 Valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}_i^2$ d'un fragment dans l'état du système total

Soit $\hat{\mathbf{J}}_i^2$ le carré du moment angulaire du fragment i . Comme $\hat{\mathbf{J}}_1$ et $\hat{\mathbf{J}}_2$ se couplent à $\mathbf{0}$, on s'attend à ce que leurs carrés aient la même valeur moyenne. Les états $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ étant des états déformés à cause de la polarisation coulombienne et des effets de couche dans chaque fragment, ce sont des combinaisons linéaires d'états propres du moment angulaire. Puisqu'ils sont états propres de \hat{J}_z , associés aux valeurs propres $M_1 \hbar$ et $M_2 \hbar$ respectivement, leur décomposition s'écrit :

$$|\Psi_i(M_i)\rangle = \sum_{I \geq |M_i|} a_I^{(i)} |\Phi_i(I, M_i)\rangle \quad (\text{VI-3})$$

avec $|\Phi_i(I, M_i)\rangle$ état propre de $\hat{\mathbf{J}}_i^2$ et de \hat{J}_{zi} ($-I \leq M_i \leq I$) supposé normé à un :

$$\hat{\mathbf{J}}_i^2 |\Phi_i(I, M_i)\rangle = I(I+1) \hbar^2 |\Phi_i(I, M_i)\rangle \quad (\text{VI-4})$$

$$\hat{J}_{zi} |\Phi_i(I, M_i)\rangle = M \hbar |\Phi_i(I, M_i)\rangle. \quad (\text{VI-5})$$

Les coefficients $a_I^{(i)}$ s'obtiennent formellement par la méthode de projection de Peierls et Yoccoz [67]. Compte tenu du couplage des moments angulaires I_1 et I_2 :

$$|\Phi_1(I_1, M_1)\rangle \otimes |\Phi_2(I_2, M_2)\rangle = \sum_{J=|I_1-I_2|}^{I_1+I_2} C_{I_1, M_1; I_2, M_2}^{J, M_1+M_2} |\Phi(I_1, I_2; J, M_1+M_2)\rangle \quad (\text{VI-6})$$

où les coefficients

$$C_{I_1, M_1; I_2, M_2}^{J, M_1+M_2} = \langle \Phi(I_1, I_2; J, M_1+M_2) | \left(|\Phi_1(I_1, M_1)\rangle \otimes |\Phi_2(I_2, M_2)\rangle \right) \rangle \quad (\text{VI-7})$$

sont les coefficients de Clebsch-Gordan [128], le produit tensoriel des états $|\Psi_i(M_i)\rangle$ (VI-3) s'écrit :

$$|\Psi_1(M_1)\rangle \otimes |\Psi_2(M_2)\rangle = \sum_{I_1=|M_1|}^{\infty} \sum_{I_2=|M_2|}^{\infty} a_{I_1}^{(1)} a_{I_2}^{(2)} \sum_{J=|I_1-I_2|}^{I_1+I_2} C_{I_1,M_1;I_2,M_2}^{J,M_1+M_2} |\Phi(I_1, I_2; J, M_1 + M_2)\rangle. \quad (\text{VI-8})$$

Réordonnons la triple somme dans l'expression ci-dessus :

$$|\Psi_1(M_1)\rangle \otimes |\Psi_2(M_2)\rangle = \sum_{J=0}^{\infty} \left(\sum_{I_1=|M_1|}^{\infty} \sum_{I_2=|J-I_1|}^{J+I_1} a_{I_1}^{(1)} a_{I_2}^{(2)} C_{I_1,M_1;I_2,M_2}^{J,M_1+M_2} |\Phi(I_1, I_2; J, M_1 + M_2)\rangle \right) \quad (\text{VI-9})$$

puis projetons sur le sous-espace des états propres de $\hat{\mathbf{J}}^2$ associés à $J = 0$:

$$\hat{P}_0 |\Psi_1(M_1)\rangle \otimes |\Psi_2(M_2)\rangle = \sum_{I=|M_1|}^{\infty} a_I^{(1)} a_I^{(2)} C_{I,M_1;I,M_2}^{0,M_1+M_2} |\Phi(I, I; 0, M_1 + M_2)\rangle. \quad (\text{VI-10})$$

Or M_1 et M_2 doivent vérifier la condition :

$$|M_1 + M_2| \leq J \quad (\text{VI-11})$$

pour que $C_{I,M_1;I,M_2}^{J,M_1+M_2}$ soit non nul, donc pour $J = 0$ l'état projeté $|\Psi\rangle$ est proportionnel à $\delta_{-M_1 M_2}$. Compte tenu de la valeur de $C_{I,M;I,-M}^{0,0}$:

$$C_{I,M;I,-M}^{0,0} = \frac{(-1)^{I-M}}{\sqrt{2I+1}}, \quad (\text{VI-12})$$

on en déduit l'expression suivante pour $|\Psi\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \delta_{M_1, -M_2} |R\rangle \otimes \sum_{I=|M_1|}^{\infty} a_I^{(1)} a_I^{(2)} \frac{(-1)^{I-M}}{\sqrt{2I+1}} |\Phi(I, I; 0, 0)\rangle. \quad (\text{VI-13})$$

Puisque les coefficients de Clebsch-Gordan sont réels, on a :

$$\begin{aligned} & \left(\langle \Phi_1(I_1, M_1) | \otimes \langle \Phi_2(I_2, M_2) | \right) |\Phi(I_1, I_2; J, M_1 + M_2)\rangle \\ &= \langle \Phi(I_1, I_2; J, M_1 + M_2) | \left(|\Phi_1(I_1, M_1)\rangle \otimes |\Phi_2(I_2, M_2)\rangle \right) \rangle = C_{I_1,M_1;I_2,M_2}^{J,M_1+M_2}, \end{aligned} \quad (\text{VI-14})$$

ce qui permet de décomposer $|\Phi(I, I; J, M')\rangle$ sur la base des états produits tensoriels $|\Phi_1(I_1, M_1)\rangle \otimes |\Phi_2(I_2, M_2)\rangle$, selon :

$$|\Phi(I, I; 0, 0)\rangle = \sum_{M'_1=-I}^I \sum_{M'_2=-I}^I C_{I,M'_1;I,M'_2}^{J,M'} |\Phi_1(I, M'_1)\rangle \otimes |\Phi_2(I, M'_2)\rangle \quad (\text{VI-15})$$

avec $M'_1 + M'_2 = M'$ et $|M'| \leq J$. Dans le cas qui nous intéresse, $J = 0$, donc $M' = 0$. Par conséquent, en utilisant l'expression (VI-12) de $C_{I,M'_1;I,-M'_1}^{0,0}$, on trouve finalement :

$$|\Psi\rangle = \delta_{M_1, -M_2} (-1)^{M_1} |R\rangle \otimes \sum_{I=|M_1|}^{\infty} \left(\frac{a_I^{(1)} a_I^{(2)}}{2I+1} \sum_{M=-I}^I (-1)^M |\Phi_1(I, M)\rangle \otimes |\Phi_2(I, -M)\rangle \right). \quad (\text{VI-16})$$

Ayant déterminé l'expression de l'état du système total $|\Psi\rangle$ en termes de produits tensoriels d'états propres de $\hat{\mathbf{J}}_1^2$ et $\hat{\mathbf{J}}_2^2$, il devient aisé de calculer la valeur moyenne de ces opérateurs dans l'état $|\Psi\rangle$. En effet, l'action de $\hat{\mathbf{J}}_1^2$ sur $|\Psi\rangle$ s'écrit, puisque $\hat{\mathbf{J}}_1^2$ laisse invariante la fonction d'onde, radiale, du mouvement relatif :

$$\hat{\mathbf{J}}_1^2|\Psi\rangle = \delta_{M_1, -M_2}(-1)^{M_1} |R\rangle \otimes \sum_{I=|M_1|}^{\infty} \left[\frac{a_I^{(1)} a_I^{(2)}}{2I+1} \sum_{M=-I}^I (-1)^M \left(\hat{\mathbf{J}}_1^2 |\Phi_1(I, M)\rangle \right) \otimes |\Phi_2(I, -M)\rangle \right]. \quad (\text{VI-17})$$

Avec la propriété (VI-4), il vient :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_1^2|\Psi\rangle &= \delta_{M_1, -M_2}(-1)^{M_1} \hbar^2 |R\rangle \\ &\otimes \sum_{I=|M_1|}^{\infty} \left(\frac{I(I+1) a_I^{(1)} a_I^{(2)}}{2I+1} \sum_{M=-I}^I (-1)^M |\Phi_1(I, M)\rangle \otimes |\Phi_2(I, -M)\rangle \right). \end{aligned} \quad (\text{VI-18})$$

Il est intéressant de remarquer que l'action de $\hat{\mathbf{J}}_1^2$ sur $|\Psi\rangle$ est invariante par permutation des fragments 1 et 2. Cela signifie qu'elle est identique à l'action de $\hat{\mathbf{J}}_2^2$ sur $|\Psi\rangle$ et se traduit par l'égalité des valeurs moyennes de ces deux opérateurs dans l'état $|\Psi\rangle$. Celles-ci découlent de (VI-18) et de l'orthonormalité des états $|\Phi_i(I, M)\rangle$:

$$\langle \hat{\mathbf{J}}_1^2 \rangle = \langle \hat{\mathbf{J}}_2^2 \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}_i^2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\sum_I \frac{I(I+1)}{2I+1} |a_I^{(1)}|^2 |a_I^{(2)}|^2}{\sum_I \frac{1}{2I+1} |a_I^{(1)}|^2 |a_I^{(2)}|^2}. \quad (\text{VI-19})$$

Dans la suite, la valeur commune de $\langle \hat{\mathbf{J}}_1^2 \rangle$ et $\langle \hat{\mathbf{J}}_2^2 \rangle$ sera notée simplement $\langle J^2 \rangle$. Compte tenu de la relation de définition (VI-1) du spin J_i du fragment i , et de l'égalité précédente, on en déduit que chaque fragment emporte le même spin, dorénavant noté J_{frag} , relié à $\langle J^2 \rangle$ par :

$$J_{\text{frag}}(J_{\text{frag}} + 1) = \langle J^2 \rangle. \quad (\text{VI-20})$$

A ce stade du calcul, aucune approximation sur la projection n'a été faite. Cependant, les $|a_I^{(i)}|^2$ restent à déterminer. Pour éviter la difficulté de la projection à la Peierls-Yoccoz et puisqu'à ce stade exploratoire on recherche un ordre de grandeur de J_{frag} , on les estime par une formule approchée due à Badhuri et Das Gupta [129]. En considérant la déformation assez grande et stable, de telle sorte que les fragments puissent être assimilés à des rotateurs rigides, ils obtiennent, dans une approche de moyenne thermique d'états appartenant à une bande rotationnelle :

$$|a_I^{(i)}|^2 = \frac{2(2I+1)}{\langle \hat{\mathbf{J}}_i^2 \rangle_{\text{int}}} e^{-I(I+1)/\langle \hat{\mathbf{J}}_i^2 \rangle_{\text{int}}} \quad (\text{VI-21})$$

où $\langle \hat{\mathbf{J}}_i^2 \rangle_{\text{int}}$ désigne la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}_i^2$ dans l'état intrinsèque $|\Psi_i\rangle$. Il est à noter que les auteurs de la référence [48] ont obtenu une expression identique pour les $|a_I^{(i)}|^2$ par un raisonnement en termes de fluctuations quantiques d'un rotateur contraint. L'expression (VI-19) devient finalement, dans la limite des grandes valeurs de $\langle \hat{\mathbf{J}}_i^2 \rangle_{\text{int}}$:

$$\langle J^2 \rangle \approx \left(\frac{1}{\langle \hat{\mathbf{J}}_2^2 \rangle_i^{(\text{int})}} + \frac{1}{\langle \hat{\mathbf{J}}_2^2 \rangle_i^{(\text{int})}} \right)^{-1}. \quad (\text{VI-22})$$

Pour un jeu de valeurs de $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_i^{(int)}$ quelconques, même faibles (i.e. de l'ordre de $15 \hbar^2$), nous avons vérifié que la formule approchée (VI-22) et la somme exacte (VI-19) avec la forme (VI-21) des $|a_I^{(i)}|^2$ différaient d'au plus 20 % environ. L'écart variant en sens contraire de $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_i^{(int)}$, l'expression (VI-22) est une assez bonne approximation pour la gamme des valeurs de $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_i^{(int)}$ que nous aurons à considérer (entre $15 \hbar^2$ et $150 \hbar^2$).

Il ne nous reste plus qu'à calculer $\langle \hat{\mathbf{J}}_i^2 \rangle_{int}$ et c'est précisément l'objet du chapitre VII qui suit.

CHAPITRE VII

Calcul de la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ intrinsèque des fragments

VII.1 Position du problème

Soit un noyau fissionnant \mathcal{N} composé de deux fragments \mathcal{F}_1 et \mathcal{F}_2 . Le but est de donner un sens **approché** à la valeur moyenne de l'opérateur non local $\hat{\mathbf{J}}^2$ pour chacun des deux sous-systèmes et de la calculer. Cette quantité relative à \mathcal{F}_i sera nommée « valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ intrinsèque du fragment i » et notée $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_i^{(\text{intr})}$. Pour atteindre ce but, on décrit le système total de façon approchée par un état $|\Psi\rangle$ de type BCS, qui n'est pas un produit tensoriel de la forme $|\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle$ compte tenu de l'interaction entre les deux sous-systèmes. En outre, on suppose que les états individuels $|\varphi_i\rangle$ qui composent $|\Psi\rangle$ possèdent la symétrie axiale de révolution autour de la direction de fission z , autrement dit :

$$\hat{j}_z |\varphi_i\rangle = \Omega_i \hbar |\varphi_i\rangle . \quad (\text{VII-1})$$

Par ailleurs, la condition physique suivante sur la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ intrinsèque doit être vérifiée : si un fragment possède une déformation très faible, autrement dit s'il est quasiment sphérique, alors la quantité $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_i^{(\text{intr})}$ qui le caractérise doit avoisiner 0. Cela implique de calculer cette quantité par rapport à son centre de masse C_i .

VII.2 L'opérateur $\hat{\mathbf{J}}^2$

L'opérateur $\hat{\mathbf{J}}^2$ comporte une partie à un corps et une partie à deux corps séparable :

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \sum_i \hat{\mathbf{j}}_i^2 + \sum_{i \neq k} \hat{\mathbf{j}}_i \cdot \hat{\mathbf{j}}_k \quad (\text{VII-2})$$

où $\hat{\mathbf{j}}_i$ est l'opérateur de moment angulaire agissant sur la $i^{\text{ème}}$ particule. Par souci de généralité, on note \hat{O}_1 le premier terme de $\hat{\mathbf{J}}^2$ (opérateur à un corps) et \hat{O}_2 le deuxième

terme (opérateur à deux corps). En seconde quantification, les opérateurs \hat{O}_1 et \hat{O}_2 ont pour expression :

$$\hat{O}_1 = \sum_{i,j} \langle i | \hat{o}_1 | j \rangle a_i^\dagger a_j \quad (\text{VII-3})$$

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij | \hat{o}_2 | kl \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k . \quad (\text{VII-4})$$

L'ensemble $\{|i\rangle\}$ désigne une base quelconque de l'espace des états à une particule. Les opérateurs \hat{o}_1 et \hat{o}_2 agissent respectivement dans l'espace des états à une et deux particules :

$$\hat{o}_1 = \hat{\mathbf{j}}^2 = (\hat{\boldsymbol{\ell}} \otimes \mathbf{1}_s + \mathbf{1}_r \otimes \hat{\mathbf{s}})^2 = \hat{\boldsymbol{\ell}}^2 \otimes \mathbf{1}_s + \mathbf{1}_r \otimes \hat{\mathbf{s}}^2 + 2 \hat{\boldsymbol{\ell}} \otimes \hat{\mathbf{s}} \quad (\text{VII-5})$$

$$\hat{o}_2 = 2 \hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2 = 2 (\hat{\boldsymbol{\ell}} \otimes \mathbf{1}_s + \mathbf{1}_r \otimes \hat{\mathbf{s}})_1 \cdot (\hat{\boldsymbol{\ell}} \otimes \mathbf{1}_s + \mathbf{1}_r \otimes \hat{\mathbf{s}})_2 . \quad (\text{VII-6})$$

L'opérateur de moment cinétique orbital $\hat{\boldsymbol{\ell}}$ est défini par :

$$\hat{\boldsymbol{\ell}} = \hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{p}} \quad (\text{VII-7})$$

où le vecteur \mathbf{r} a pour origine le point O , origine du repère « intrinsèque » attaché au système total \mathcal{N} (c'est-à-dire défini par les axes principaux d'inertie de \mathcal{N}). De ce fait, l'opérateur $\hat{\mathbf{J}}^2$ défini dans l'eq.(VII-2) est implicitement relatif à ce point, ce qui, désormais, sera précisé par un indice.

Pour le fragment i , l'opérateur pertinent est $\hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2$, où C_i est le centre de masse du fragment i . Il est défini de la même façon que $\hat{\mathbf{J}}_O^2$ en remplaçant $\hat{\boldsymbol{\ell}}$ par :

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}_{C_i} = \hat{\boldsymbol{\ell}} - O\mathbf{C}_i \wedge \hat{\mathbf{p}} . \quad (\text{VII-8})$$

VII.3 Approche par pseudo-projection spatiale

On considère deux opérateurs $\hat{\mathcal{P}}_\delta$ et $\hat{\mathcal{Q}}_\delta$ agissant dans l'espace de Fock et définis par :

$$\hat{\mathcal{P}}_\delta = \mathbf{1}_0 \oplus \hat{P}_\delta^{(1)} \oplus \dots \oplus \hat{P}_\delta^{(p)} \oplus \dots \quad (\text{VII-9})$$

$$\hat{\mathcal{Q}}_\delta = \mathbf{1}_0 \oplus \hat{Q}_\delta^{(1)} \oplus \dots \oplus \hat{Q}_\delta^{(p)} \oplus \dots \quad (\text{VII-10})$$

où l'opérateur $\hat{P}_\delta^{(p)}$ est un produit tensoriel de p opérateurs identiques \hat{P}_δ agissant dans l'espace des états à une particule :

$$\hat{P}_\delta^{(p)} = (\hat{P}_\delta)_1 \otimes \dots \otimes (\hat{P}_\delta)_p , \quad (\text{VII-11})$$

et $\mathbf{1}_0$ l'identité sur l'espace des états à 0 particule, sous-tendu par le seul état $|0\rangle$ (appelé vide de particules). Il en va de même pour $\hat{Q}_\delta^{(p)}$ avec des notations similaires. Les opérateurs \hat{P}_δ et \hat{Q}_δ sont définis par :

$$\begin{aligned} \hat{P}_\delta &= \int d^3\mathbf{r} F_\delta(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| \otimes \mathbf{1}_s \\ \hat{Q}_\delta &= \int d^3\mathbf{r} G_\delta(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| \otimes \mathbf{1}_s , \end{aligned} \quad (\text{VII-12})$$

où $F_\delta(\mathbf{r})$ et $G_\delta(\mathbf{r})$ sont deux fonctions de \mathbb{R}^3 à valeurs dans \mathbb{R} . Ce sont donc deux opérateurs hermitiques. De plus, ils possèdent la propriété d'idempotence **si et seulement si** $(F_\delta)^2 = F_\delta$ **et** $(G_\delta)^2 = G_\delta$.

Désignons par $\hat{\mathcal{A}}_\delta$ indifféremment l'opérateur $\hat{\mathcal{P}}_\delta$ ou $\hat{\mathcal{Q}}_\delta$. Le carré de cet opérateur a pour expression :

$$\hat{\mathcal{A}}_\delta^2 = \mathbf{1}_0 \oplus [\hat{A}_\delta^{(1)}]^2 \oplus \cdots \oplus [\hat{A}_\delta^{(p)}]^2 \oplus \cdots \quad (\text{VII-13})$$

avec :

$$[\hat{A}_\delta^{(p)}]^2 = (\hat{A}_\delta)_1^2 \otimes \cdots \otimes (\hat{A}_\delta)_p^2. \quad (\text{VII-14})$$

Par conséquent, $\hat{\mathcal{A}}_\delta$ est un projecteur si et seulement si \hat{A}_δ en est un. On l'appelle pseudo-projecteur, ainsi que \hat{P}_δ et \hat{Q}_δ . En outre, la somme de $\hat{\mathcal{P}}_\delta$ et de $\hat{\mathcal{Q}}_\delta$ diffère de l'identité. En effet, on a :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}_\delta + \hat{\mathcal{Q}}_\delta &= 2\mathbf{1}_0 \oplus \cdots \oplus (\hat{P}_\delta^{(p)} + \hat{Q}_\delta^{(p)}) \oplus \cdots \\ &\neq \mathbf{1}_0 \oplus \cdots \oplus \left[(\hat{P}_\delta + \hat{Q}_\delta)_1 \otimes \cdots \otimes (\hat{P}_\delta + \hat{Q}_\delta)_p \right] \oplus \cdots = \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (\text{VII-15})$$

Le pseudo-projecteur $\hat{\mathcal{A}}_\delta$ est une somme infinie d'opérateur à 1 corps, 2 corps, ... puisqu'il peut s'écrire comme :

$$\hat{\mathcal{A}}_\delta = \mathbf{1}_0 + \sum_{p=1}^{\infty} \hat{\mathcal{A}}_\delta^{(p)} \quad (\text{VII-16})$$

où $\hat{\mathcal{A}}_\delta^{(p)}$ est l'opérateur à p corps de l'espace de Fock ayant pour expression :

$$\hat{\mathcal{A}}_\delta^{(p)} = \sum_{i_1, \dots, i_p} \sum_{j_1, \dots, j_p} \langle i_1 \cdots i_p | \hat{P}_\delta^{(p)} | j_1 \cdots j_p \rangle a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_p}^\dagger a_{j_p} \cdots a_{j_1}. \quad (\text{VII-17})$$

Il agit sur un déterminant de Slater $1/\sqrt{p!} \hat{A}(|i_1\rangle \otimes \cdots \otimes |i_p\rangle)$ (\hat{A} étant l'opérateur d'antisymétrisation) selon :

$$\hat{\mathcal{A}}_\delta^{(p)} \left[\frac{1}{\sqrt{p!}} \hat{A}(|i_1\rangle \otimes \cdots \otimes |i_p\rangle) \right] = \frac{1}{\sqrt{p!}} \hat{A}(\hat{P}_\delta |i_1\rangle \otimes \cdots \otimes \hat{P}_\delta |i_p\rangle), \quad (\text{VII-18})$$

ce que l'on peut écrire en seconde quantification sous la forme :

$$\hat{\mathcal{A}}_\delta^{(p)} a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_p}^\dagger |0\rangle = a_{i'_1}^\dagger \cdots a_{i'_p}^\dagger |0\rangle, \quad (\text{VII-19})$$

avec $|i'_k\rangle = \hat{A}_\delta |i_k\rangle$, \hat{A}_δ désignant indifféremment \hat{P}_δ ou \hat{Q}_δ . L'état $|\Psi\rangle$ de type BCS considéré dans les sections précédentes prend la forme :

$$|\Psi\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |0\rangle \quad (\text{VII-20})$$

où $|0\rangle$ désigne le vide de particules et où $\prod_{i>0}$ signifie le produit sur les paires d'états conjugués par renversement du temps. Comme c'est une combinaison linéaire de déterminants de Slater (contenant différents nombres de particules), l'action du pseudo-projecteur $\hat{\mathcal{A}}_\delta$ sur cet état s'écrit :

$$\hat{\mathcal{A}}_\delta |\Psi\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i a_{i'}^\dagger a_{\bar{i}'}^\dagger) |0\rangle, \quad (\text{VII-21})$$

où $a_{i'}^\dagger|0\rangle = |i'\rangle = \hat{A}_\delta|i\rangle$ et $a_{\bar{i}'}^\dagger|0\rangle = |\bar{i}'\rangle = \hat{A}_\delta|\bar{i}\rangle$.

Dans la suite, on considère le cas où les deux pseudo-projecteurs \hat{P}_δ et \hat{Q}_δ sont complémentaires dans \mathbb{R}^3 , c'est-à-dire : $F_\delta + G_\delta = 1$. Ils vérifient alors l'identité :

$$\hat{P}_\delta + \hat{Q}_\delta = \mathbf{1}_r \otimes \mathbf{1}_s. \quad (\text{VII-22})$$

Ce sont des opérateurs à un corps hermitiques et invariants par renversement du temps. L'action de \hat{P}_δ sur un état individuel $|\varphi\rangle$ décomposé sur la base $\{|\mathbf{r}\Sigma\rangle \equiv |\mathbf{r}\rangle \otimes |\Sigma\rangle\}$ de l'espace $\mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$ des états à une particule avec spin :

$$|\varphi\rangle = \sum_{\Sigma} |\varphi^{(\Sigma)}\rangle \otimes |\Sigma\rangle, \quad (\text{VII-23})$$

avec :

$$|\varphi^{(\Sigma)}\rangle = \int d^3\mathbf{r} \varphi^{(\Sigma)}(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle, \quad (\text{VII-24})$$

s'écrit :

$$\langle \mathbf{r}\Sigma | \hat{P}_\delta | \varphi \rangle = F_\delta(\mathbf{r}) \varphi^{(\Sigma)}(\mathbf{r}). \quad (\text{VII-25})$$

Puisque l'on cherche à définir la valeur moyenne de \mathbf{J}^2 pour chaque fragment, on va s'intéresser à une fonction F_δ valant approximativement 1 dans la région de l'espace occupée par le fragment considéré et nulle partout ailleurs. Or le fragment ne présente pas de bords abrupts mais plutôt une surface diffuse, caractérisée par un paramètre de diffusivité noté δ . Donc pour épouser au mieux cette forme de bord adouci et compte tenu de la symétrie de notre problème (axe de symétrie z), on choisit pour F_δ la fonction de Fermi suivant la direction de fission z :

$$F_\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{1 + e^{\frac{z-z_0}{\delta}}}. \quad (\text{VII-26})$$

La base $\{|\Sigma\rangle\}$ de l'espace \mathcal{E}_s des états de spin $s = 1/2$ que l'on utilise dans la suite est celle formée des vecteurs propres $|s\Sigma\rangle$ communs à \hat{s}^2 et \hat{s}_z :

$$\begin{aligned} \hat{s}^2|\Sigma\rangle &= s(s+1)\hbar^2|\Sigma\rangle \\ \hat{s}_z|\Sigma\rangle &= \Sigma\hbar|\Sigma\rangle. \end{aligned} \quad (\text{VII-27})$$

On rappelle que \hat{A}_δ l'un quelconque des deux projecteurs \hat{P}_δ ou \hat{Q}_δ . Puisque la fonction de projection F_δ ne dépend que de z , on peut décomposer \hat{A}_δ en produit tensoriel de trois opérateurs agissant dans \mathcal{E}_z , \mathcal{E}_x , et \mathcal{E}_y :

$$\hat{A}_\delta = (\hat{A}_\delta^{(z)} \otimes \mathbf{1}_x \otimes \mathbf{1}_y) \otimes \mathbf{1}_s \quad (\text{VII-28})$$

où $\hat{A}_\delta^{(z)}$ est le pseudo-projecteur suivant z :

$$\hat{A}_\delta^{(z)} = \int_{-\infty}^{\infty} dz F_\delta(z) |z\rangle\langle z|, \quad (\text{VII-29})$$

où l'on a gardé pour la fonction à une variable figurant devant le projecteur $|z\rangle\langle z|$ la notation F_δ précédemment utilisée pour une fonction à 3 variables. Par conséquent, \hat{A}_δ laisse invariants les états appartenant à $\mathcal{E}_x \otimes \mathcal{E}_y$: il commute avec les opérateurs dépendant de x et y en coordonnées cartésiennes, ou de ρ et φ en coordonnées cylindriques, ainsi que les opérateurs de spin et l'opérateur de renversement du temps. En particulier, \hat{A}_δ **commute avec** $\hat{j}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi \otimes \mathbf{1}_s + \mathbf{1}_r \otimes \hat{s}_z$:

$$[\hat{j}_z, \hat{A}_\delta] = 0. \quad (\text{VII-30})$$

VII.4 Définition de la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ intrinsèque des fragments

On définit $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_1^{(\text{intr})}$ comme la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{\mathbf{J}}_{C_1}^2$ dans l'état $|\Psi_1\rangle$ du fragment \mathcal{F}_1 obtenu en faisant agir le pseudo-projecteur $\hat{\mathcal{P}}_\delta$ sur l'état $|\Psi\rangle$ du système total. On procède de façon analogue pour le fragment \mathcal{F}_2 avec le pseudo-projecteur $\hat{\mathcal{Q}}_\delta$:

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_1^{(\text{intr})} &\equiv \langle \Psi_1 | \hat{\mathbf{J}}_{C_1}^2 | \Psi_1 \rangle = \langle \Psi | \hat{\mathcal{P}}_\delta^\dagger \hat{\mathbf{J}}_{C_1}^2 \hat{\mathcal{P}}_\delta | \Psi \rangle \\ \langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_2^{(\text{intr})} &\equiv \langle \Psi_2 | \hat{\mathbf{J}}_{C_2}^2 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi | \hat{\mathcal{Q}}_\delta^\dagger \hat{\mathbf{J}}_{C_2}^2 \hat{\mathcal{Q}}_\delta | \Psi \rangle.\end{aligned}\quad (\text{VII-31})$$

Compte tenu de l'action de $\hat{\mathcal{A}}_\delta$ sur un état de type BCS (VII-21), $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_i^{(\text{intr})}$ prend la forme :

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_i^{(\text{intr})} &= \sum_i v_i^2 \langle i | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 \hat{A}_\delta | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \left(v_i^2 v_k^2 \langle ik | (\hat{A}_\delta \otimes \hat{A}_\delta) [2 (\hat{\mathbf{j}}_{C_i})_1 \cdot (\hat{\mathbf{j}}_{C_i})_2] (\hat{A}_\delta \otimes \hat{A}_\delta) | i\bar{k} \rangle \right. \\ &\quad \left. + u_i v_i u_k v_k \langle i\bar{i} | (\hat{A}_\delta \otimes \hat{A}_\delta) (2 [\hat{\mathbf{j}}_{C_i})_1 \cdot (\hat{\mathbf{j}}_{C_i})_2] (\hat{A}_\delta \otimes \hat{A}_\delta) | k\bar{k} \rangle \right)\end{aligned}\quad (\text{VII-32})$$

avec $A = P$ pour le fragment gauche ($i = 1$) et $A = Q$ pour le fragment droit ($i = 2$).

Considérons l'opérateur $\hat{\mathbf{J}}_M^2$ par rapport à un point quelconque M . Grâce à la propriété de complémentarité (VII-22), sa valeur moyenne dans l'état $|\Psi\rangle$ du noyau fissionnant \mathcal{N} peut être mise sous la forme :

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}_M^2 | \Psi \rangle &= \sum_{A,B} \sum_i v_i^2 \langle i | \hat{A}_\delta \hat{o}_1^{(M)} \hat{B}_\delta | i \rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{A,B,C,D} \sum_{i,k} \left(v_i^2 v_k^2 \langle ik | (\hat{A}_\delta \otimes \hat{B}_\delta) \hat{o}_2^{(M)} (\hat{C}_\delta \otimes \hat{D}_\delta) | i\bar{k} \rangle \right. \\ &\quad \left. + u_i v_i u_k v_k \langle i\bar{i} | (\hat{A}_\delta \otimes \hat{B}_\delta) \hat{o}_2^{(M)} (\hat{C}_\delta \otimes \hat{D}_\delta) | k\bar{k} \rangle \right),\end{aligned}\quad (\text{VII-33})$$

où les opérateurs $\hat{A}_\delta, \hat{B}_\delta, \hat{C}_\delta, \hat{D}_\delta$ désignent indifféremment le pseudo-projecteur \hat{P}_δ ou \hat{Q}_δ . En posant :

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathbf{J}}_M^2 \rangle_{\langle 1|2 \rangle} &= 2 \sum_i v_i^2 \langle i | \hat{P}_\delta \hat{o}_1^{(M)} \hat{Q}_\delta | i \rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_A \sum_{i,k} \left(v_i^2 v_k^2 \langle ik | [\hat{o}_2^{(M)} - (\hat{A}_\delta \otimes \hat{A}_\delta) \hat{o}_2^{(M)} (\hat{A}_\delta \otimes \hat{A}_\delta)] | i\bar{k} \rangle \right. \\ &\quad \left. + u_i v_i u_k v_k \langle i\bar{i} | [\hat{o}_2^{(M)} - (\hat{A}_\delta \otimes \hat{A}_\delta) \hat{o}_2^{(M)} (\hat{A}_\delta \otimes \hat{A}_\delta)] | k\bar{k} \rangle \right),\end{aligned}\quad (\text{VII-34})$$

quantité nommée terme de recouvrement, l'expression (VII-33) devient :

$$\langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}_M^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi_1 | \hat{\mathbf{J}}_M^2 | \Psi_1 \rangle + \langle \Psi_2 | \hat{\mathbf{J}}_M^2 | \Psi_2 \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_M^2 \rangle_{\langle 1|2 \rangle}. \quad (\text{VII-35})$$

Notons $\langle \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 \rangle_i^{(K)}$ la différence entre $\langle \Psi_i | \hat{\mathbf{J}}_O^2 | \Psi_i \rangle$ et $\langle \Psi_i | \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 | \Psi_i \rangle$, où O est le centre de masse de \mathcal{N} et C_i celui du fragment \mathcal{F}_i . Cette quantité provient de la translation de O en C_i du

point d'application de $\hat{\mathbf{J}}^2$, autrement dit du terme en $\mathbf{OC}_i \wedge \hat{\mathbf{p}}$ dans l'expression (VII-8) de $\hat{\ell}_{C_i}$. On l'appelle terme de Koenig associé à \mathcal{F}_i . La valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ du système total \mathcal{N} , calculée par rapport à O , peut alors se décomposer selon :

$$\langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}_O^2 | \Psi \rangle = \langle \hat{\mathbf{J}}_1^2 \rangle_1^{(\text{intr})} + \langle \hat{\mathbf{J}}_2^2 \rangle_2^{(\text{intr})} + \langle \hat{\mathbf{J}}_O^2 \rangle_{\langle 1|2 \rangle} + \left(\langle \hat{\mathbf{J}}_{C_1}^2 \rangle_1^{(K)} + \langle \hat{\mathbf{J}}_{C_2}^2 \rangle_2^{(K)} \right). \quad (\text{VII-36})$$

On interprète l'expression (VII-36) de la manière suivante : les deux premiers termes sont les contributions propres à chaque fragment, le troisième est le terme de recouvrement (contenant les termes croisés dûs à la non localité de l'opérateur $\hat{\mathbf{J}}^2$), tandis que les deux derniers sont les termes de Koenig associés à chaque fragment. Comme ils ne contiennent pas de termes croisés, **toute la non localité de $\hat{\mathbf{J}}^2$ est contenue dans le terme de recouvrement** $\langle \hat{\mathbf{J}}_O^2 \rangle_{\langle 1|2 \rangle}$.

VII.5 Calcul de la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ intrinsèque des fragments

Dans l'expression (VII-32), les sommes portent sur toute la base $\{|i\rangle\}$ des états individuels Hartree-Fock à partir de laquelle est construit l'état $|\Psi\rangle$. Le ket $|\bar{i}\rangle$ représente l'état obtenu par l'action de l'opérateur \hat{t} de renversement du temps sur $|i\rangle$. Partant d'une fonction d'essai qui ne brise pas la symétrie associée à cet opérateur et étant donné que l'interaction effective utilisée possède cette symétrie, le processus de convergence, qui conserve cette dernière, conduit à une solution invariante par renversement du temps. Le hamiltonien de Hartree-Fock possède donc aussi cette symétrie et par conséquent la dégénérescence de Kramers permet de restreindre les sommes sur i aux états « positifs », c'est-à-dire sommer sur les paires d'états conjugués par renversement du temps $\{|i\rangle, |\bar{i}\rangle\}$ avec $\Omega_i > 0$. Pour des opérateurs à un corps \hat{O}_1 et à deux corps \hat{O}_2 quelconques, on obtient :

$$\langle \Psi | \hat{O}_1 | \Psi \rangle = \sum_{i>0} v_i^2 \left(\langle i | \hat{O}_1 | i \rangle + \langle \bar{i} | \hat{O}_1 | \bar{i} \rangle \right) \quad (\text{VII-37})$$

$$\langle \Psi | \hat{O}_2 | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,k>0} \left[v_i^2 v_k^2 \left(\langle ik | \hat{O}_2 | \widetilde{ik} \rangle + \langle \bar{i}k | \hat{O}_2 | \widetilde{\bar{i}k} \rangle + \langle i\bar{k} | \hat{O}_2 | \widetilde{i\bar{k}} \rangle + \langle \bar{i}\bar{k} | \hat{O}_2 | \widetilde{\bar{i}\bar{k}} \rangle \right) \right. \quad (\text{VII-38})$$

$$\left. + u_i v_i u_k v_k \left(\langle i\bar{i} | \hat{O}_2 | k\bar{k} \rangle - \langle \bar{i}i | \hat{O}_2 | k\bar{k} \rangle - \langle i\bar{i} | \hat{O}_2 | \bar{k}k \rangle + \langle \bar{i}i | \hat{O}_2 | \bar{k}k \rangle \right) \right]. \quad (\text{VII-39})$$

Dans le terme en $u_i v_i u_k v_k$, on regroupe les termes deux à deux de manière à faire apparaître les éléments de matrice antisymétrisés de \hat{O}_2 et on utilise leur antisymétrie par rapport aux deux premiers indices. Compte tenu des propriétés de l'opérateur de renversement du temps, on aboutit aux expressions générales suivantes de $\langle \Psi | \hat{O}_1 | \Psi \rangle$ et $\langle \Psi | \hat{O}_2 | \Psi \rangle$:

$$\langle \Psi | \hat{O}_1 | \Psi \rangle = \sum_{i>0} v_i^2 \langle i | (\hat{O}_1 + \hat{t}^\dagger \hat{O}_1 \hat{t}) | i \rangle \quad (\text{VII-40})$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{O}_2 | \Psi \rangle = & \frac{1}{2} \sum_{i,k>0} v_i^2 v_k^2 \left(\langle ik | (\hat{O}_2 + \hat{T}^\dagger \hat{O}_2 \hat{T}) | \widetilde{ik} \rangle + \langle \bar{i}k | (\hat{O}_2 + \hat{T}^\dagger \hat{O}_2 \hat{T}) | \widetilde{\bar{i}k} \rangle \right) \\ & + \sum_{i,k>0} u_i v_i u_k v_k \langle i\bar{i} | \hat{O}_2 | \widetilde{k\bar{k}} \rangle \end{aligned} \quad (\text{VII-41})$$

où \hat{t} est l'opérateur de renversement du temps agissant dans l'espace des états à une particule et $\hat{T} \equiv \hat{t}_1 \otimes \hat{t}_2$, dans l'espace des états à deux particules.

Dans le cas présent, l'opérateur \hat{o}_1 vaut :

$$\hat{o}_1 = \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2 \hat{A}_\delta, \quad (\text{VII-42})$$

donc il est pair sous l'action de \hat{t} , conduisant ainsi à :

$$\langle \Psi | \hat{O}_1 | \Psi \rangle = 2 \sum_{i>0} v_i^2 \langle i | \hat{o}_1 | i \rangle. \quad (\text{VII-43})$$

Quant à \hat{o}_2 , il s'écrit ici :

$$\hat{o}_2 = 2 (\hat{A}_\delta \otimes \hat{A}_\delta) [(\hat{\mathbf{j}}_{C_i})_1 \cdot (\hat{\mathbf{j}}_{C_i})_2] (\hat{A}_\delta \otimes \hat{A}_\delta). \quad (\text{VII-44})$$

C'est un opérateur impair sous l'action de $\mathbf{1}_1 \otimes \hat{t}_2$ et de $\hat{t}_1 \otimes \mathbf{1}_2$, donc pair sous celle de \hat{T} , ce qui conduit à :

$$(\mathbf{1}_1 \otimes \hat{t}_2)^\dagger \hat{o}_2 (\mathbf{1}_1 \otimes \hat{t}_2) = -\hat{o}_2 \quad (\text{VII-45})$$

$$\hat{T}^\dagger \hat{o}_2 \hat{T} = \hat{o}_2. \quad (\text{VII-46})$$

En explicitant les éléments de matrice antisymétrisés de l'expression (VII-41) et compte tenu de (VII-45) et (VII-46), on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{O}_2 | \Psi \rangle &= \sum_{i,k>0} v_i^2 v_k^2 \left(\langle ik | \hat{o}_2 | ik \rangle + \langle i\bar{k} | \hat{o}_2 | i\bar{k} \rangle - \langle ik | \hat{o}_2 | ki \rangle - \langle i\bar{k} | \hat{o}_2 | \bar{k}i \rangle \right) \\ &+ \sum_{i,k>0} u_i v_i u_k v_k \left(\langle i\bar{i} | \hat{o}_2 | k\bar{k} \rangle - \langle i\bar{i} | \hat{o}_2 | \bar{k}k \rangle \right), \end{aligned} \quad (\text{VII-47})$$

avec $\langle i\bar{k} | \hat{o}_2 | i\bar{k} \rangle = -\langle ik | \hat{o}_2 | ik \rangle$ et $\langle i\bar{i} | \hat{o}_2 | k\bar{k} \rangle = -\langle ii | \hat{o}_2 | kk \rangle$. Les termes directs en $v_i^2 v_k^2$ se simplifiant, il vient :

$$\langle \Psi | \hat{O}_2 | \Psi \rangle = - \sum_{i,k>0} v_i v_k \left[v_i v_k \left(\langle ik | \hat{o}_2 | ki \rangle + \langle i\bar{k} | \hat{o}_2 | \bar{k}i \rangle \right) + u_i u_k \left(\langle ii | \hat{o}_2 | kk \rangle + \langle i\bar{i} | \hat{o}_2 | \bar{k}k \rangle \right) \right]. \quad (\text{VII-48})$$

Compte tenu de la forme (VII-42) de l'opérateur \hat{o}_1 et de la séparabilité de \hat{o}_2 (VII-44), la somme des expressions (VII-43) et (VII-48), autrement dit $\langle \Psi | \hat{\mathcal{A}}_\delta^\dagger \hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2 \hat{\mathcal{A}}_\delta | \Psi \rangle$, vaut :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{\mathcal{A}}_\delta^\dagger \hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2 \hat{\mathcal{A}}_\delta | \Psi \rangle &= 2 \sum_{i>0} v_i^2 \langle i | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2 \hat{A}_\delta | i \rangle - 2 \sum_{i,k>0} v_i v_k \left[v_i v_k \left(\langle i | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | k \rangle \cdot \langle k | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | i \rangle \right. \right. \\ &+ \langle i | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | \bar{k} \rangle \cdot \langle \bar{k} | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | i \rangle \left. \right) + u_i u_j \left(\langle i | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | k \rangle \cdot \langle i | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | k \rangle \right. \\ &+ \left. \left. \langle i | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | \bar{k} \rangle \cdot \langle \bar{i} | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | k \rangle \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{VII-49})$$

Puisque \hat{t} est un opérateur antiunitaire (donc antilinéaire), qu'il anticommute avec $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}$ hermitique et qu'il commute avec le pseudo-projecteur \hat{A}_δ (également hermitique), on peut montrer (voir annexe D) que :

$$\langle \bar{i} | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | k \rangle = \langle i | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | \bar{k} \rangle^* = \langle \bar{k} | \hat{A}_\delta \hat{\mathbf{j}}_{C_i} \hat{A}_\delta | i \rangle. \quad (\text{VII-50})$$

Notons que, dans la relation (VII-50), les composantes x et y de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}$ ne commutent pas avec \hat{A}_δ .

On pose maintenant (a désignant k ou \bar{k}) :

$$|a'\rangle = \hat{A}_\delta |a\rangle. \quad (\text{VII-51})$$

L'expression (VII-49) de $\langle \Psi | \hat{\mathcal{A}}_\delta^\dagger \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 \hat{\mathcal{A}}_\delta | \Psi \rangle$ prend alors la même forme que celle de $\langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 | \Psi \rangle$ sans le pseudo-projecteur \hat{A}_δ :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{\mathcal{A}}_\delta^\dagger \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 \hat{\mathcal{A}}_\delta | \Psi \rangle = & 2 \sum_{i>0} v_i^2 \langle i' | \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 | i' \rangle - 2 \sum_{i,k>0} v_i v_k \left[v_i v_k \left(\langle i' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | k' \rangle \cdot \langle k' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | i' \rangle \right. \right. \\ & \left. \left. + \langle i' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | \bar{k}' \rangle \cdot \langle \bar{k}' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | i' \rangle \right) + u_i u_j \left(\langle i' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | k' \rangle \cdot \langle i' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | k' \rangle + \langle i' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | \bar{k}' \rangle \cdot \langle \bar{k}' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | k' \rangle \right) \right], \quad (\text{VII-52}) \end{aligned}$$

c'est-à-dire, en tenant compte des propriétés relatives au renversement du temps (VII-50) :

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{A}}_\delta^\dagger \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 \hat{\mathcal{A}}_\delta | \Psi \rangle = 2 \sum_{i>0} v_i^2 \langle i' | \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 | i' \rangle - 2 \sum_{i,k>0} v_i v_k (v_i v_k + u_i u_k) \left(|\langle i' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | k' \rangle|^2 + |\langle i' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | \bar{k}' \rangle|^2 \right). \quad (\text{VII-53})$$

Les états individuels $\{|i\rangle, |\bar{i}\rangle\}$ étant développés sur la base de l'oscillateur harmonique à symétrie axiale $\{|n_z\rangle \otimes |\alpha\beta\rangle \otimes |\Sigma\rangle\}$, calculer $\langle \Psi | \hat{\mathcal{A}}_\delta^\dagger \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 \hat{\mathcal{A}}_\delta | \Psi \rangle$ revient à calculer $\langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 | \Psi \rangle$ en remplaçant le vecteur de base $|n_z\rangle$ par $\hat{A}_\delta |n_z\rangle$, c'est-à-dire en remplaçant la fonction d'onde de base $\Psi_{n_z}(z)$ par la fonction d'onde « pseudo-projetée » $F_\delta(z) \Psi_{n_z}(z)$ ou $G_\delta(z) \Psi_{n_z}(z)$ suivant qu'il s'agit du fragment gauche ou droit respectivement. Par ailleurs, puisque le pseudo-projecteur \hat{A}_δ commute avec \hat{j}_z , l'état $|i'\rangle$ est encore état propre de \hat{j}_z associé à la valeur propre Ω_i :

$$\hat{j}_z \hat{A}_\delta |i\rangle = \hat{j}_z |i'\rangle = \Omega_i \hbar |i'\rangle. \quad (\text{VII-54})$$

Le calcul complet des éléments de matrice de $\hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2$ et de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}$ dans la base individuelle « pseudo-projetée » $\{|i'\rangle, |\bar{i}'\rangle\}$ figure dans l'appendice VII.A.

Appendice VII.A Eléments de matrice de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}$ et de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2$

VII.A a Principe du calcul

Pour calculer les éléments de matrice de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}$ et de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2$ entre états individuels « pseudo-projetés » $\{|i'\rangle, |\bar{i}'\rangle\}$, on décompose ces derniers sur une base de fonctions produit possédant la symétrie axiale, c'est-à-dire de la forme $f_{n_z}(z) g_{\alpha\beta}(r) e^{i\Lambda\theta}$ (où r est la coordonnée radiale et θ l'angle autour de l'axe de symétrie z). Puisque l'opérateur \hat{P}_δ n'agit que suivant z , on a :

$$\hat{P}_\delta f_{n_z}(z) g_{\alpha\beta}(r) e^{i\Lambda\theta} = (F_\delta f_{n_z})(z) g_{\alpha\beta}(r) e^{i\Lambda\theta}. \quad (\text{VII-55})$$

Par conséquent, comme annoncé dans la section VII.5, pour calculer l'élément de matrice $\langle i' | \hat{P}_\delta \hat{j} \hat{P}_\delta | k' \rangle$, où \hat{j} désigne soit $\hat{j}_{C_i}^2$, soit l'une quelconque des composantes cartésiennes de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}$, il suffit de calculer l'élément de matrice de \hat{j} entre les états $|i\rangle$ et $|k\rangle$ en remplaçant $f_{n_z}(z)$ par $(F_\delta f_{n_z})(z)$ dans la décomposition de $|i\rangle$ et $|k\rangle$. En pratique, on utilise la base de l'oscillateur harmonique à symétrie axiale, dont les fonctions d'onde sont notées $\Psi_{n_z}(z) \Psi_{n_r}^\Lambda(r) e^{i\Lambda\theta} / \sqrt{2\pi} \chi(\Sigma)$, et on exprime l'opérateur $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}$ et son carré par leurs éléments de matrice dans la base des coordonnées :

$$\langle \mathbf{r} \Sigma | \hat{\mathbf{j}}_{C_i} | \mathbf{r}' \Sigma' \rangle = \delta_{\Sigma\Sigma'} \langle \mathbf{r} | \hat{\ell}_{C_i} | \mathbf{r}' \rangle + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Sigma | \hat{\mathbf{s}} | \Sigma' \rangle \quad (\text{VII-56})$$

$$\langle \mathbf{r} \Sigma | \hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2 | \mathbf{r}' \Sigma' \rangle = \delta_{\Sigma\Sigma'} \langle \mathbf{r} | \hat{\ell}_{C_i}^2 | \mathbf{r}' \rangle + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Sigma | \hat{\mathbf{s}}^2 | \Sigma' \rangle + 2 \langle \mathbf{r} | \hat{\ell}_{C_i} | \mathbf{r}' \rangle \cdot \langle \Sigma | \hat{\mathbf{s}} | \Sigma' \rangle. \quad (\text{VII-57})$$

VII.A b Eléments de matrice de $\hat{\mathbf{s}}$ et $\hat{\mathbf{s}}^2$ dans la base $\{|\Sigma\rangle\}$

La base $\{|\Sigma\rangle\}$ est formée des vecteurs propres normés communs à \hat{s}_z et $\hat{\mathbf{s}}^2$:

$$\hat{\mathbf{s}}^2 |\Sigma\rangle = s(s+1) \hbar^2 |\Sigma\rangle \quad (\text{VII-58})$$

$$\hat{s}_z |\Sigma\rangle = \Sigma \hbar |\Sigma\rangle, \quad |\Sigma| \leq s. \quad (\text{VII-59})$$

L'action des opérateurs \hat{s}_+ et \hat{s}_- définis par

$$\hat{s}_\pm = \hat{s}_x \pm i \hat{s}_y \quad (\text{VII-60})$$

sur le vecteur de base $|\Sigma\rangle$ s'écrit :

$$\hat{s}_\pm |\Sigma\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - \Sigma(\Sigma \pm 1)} |\Sigma \pm 1\rangle. \quad (\text{VII-61})$$

On en déduit l'action de \hat{s}_x et \hat{s}_y sur $|\Sigma\rangle$:

$$\hat{s}_x |\Sigma\rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\sqrt{s(s+1) - \Sigma(\Sigma+1)} |\Sigma+1\rangle + \sqrt{s(s+1) - \Sigma(\Sigma-1)} |\Sigma-1\rangle \right) \quad (\text{VII-62})$$

$$\hat{s}_y |\Sigma\rangle = -i \frac{\hbar}{2} \left(\sqrt{s(s+1) - \Sigma(\Sigma+1)} |\Sigma+1\rangle - \sqrt{s(s+1) - \Sigma(\Sigma-1)} |\Sigma-1\rangle \right). \quad (\text{VII-63})$$

Dans le cas d'un spin $s = \frac{1}{2}$, les éléments de matrice cherchés valent :

$$\langle \Sigma | \hat{s}_x | \Sigma' \rangle = (1 - \delta_{\Sigma\Sigma'}) \frac{\hbar}{2} \quad (\text{VII-64})$$

$$\langle \Sigma | \hat{s}_y | \Sigma' \rangle = (1 - \delta_{\Sigma\Sigma'}) i \Sigma' \hbar \quad (\text{VII-65})$$

$$\langle \Sigma | \hat{s}_z | \Sigma' \rangle = \delta_{\Sigma\Sigma'} \Sigma \hbar \quad (\text{VII-66})$$

$$\langle \Sigma | \hat{\mathbf{s}}^2 | \Sigma' \rangle = \delta_{\Sigma\Sigma'} \frac{3}{4} \hbar^2. \quad (\text{VII-67})$$

VII.A c Expression des éléments de matrice de $\hat{\ell}_{C_i}$ et $\hat{\ell}_{C_i}^2$

Les éléments de matrice de $\hat{\ell}_{C_i}$ et $\hat{\ell}_{C_i}^2$ dans la base $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ ont pour expression :

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\ell}_{C_i} | \mathbf{r}' \rangle = -i\hbar (\mathbf{r} - \mathbf{OC}_i) \wedge \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{VII-68})$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{\ell}_{C_i}^2 | \mathbf{r}' \rangle = & -\hbar^2 [(\mathbf{r} - \mathbf{OC}_i)^2 \nabla^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - (\mathbf{r} - \mathbf{OC}_i) \cdot \nabla ((\mathbf{r} - \mathbf{OC}_i) \cdot \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) \\ & - (\mathbf{r} - \mathbf{OC}_i) \cdot \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]. \end{aligned} \quad (\text{VII-69})$$

Les composantes cartésiennes de l'opérateur $\hat{\ell}_{C_i}$ peuvent s'exprimer en termes d'opérateurs position et dérivation en coordonnées cylindriques selon :

$$(\hat{\ell}_x)_{C_i} = i\hbar \left[\cos \theta \frac{z - z_{C_i}}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \theta \left((z - z_{C_i}) \frac{\partial}{\partial r} - r \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \quad (\text{VII-70})$$

$$(\hat{\ell}_y)_{C_i} = i\hbar \left[-\cos \theta \left((z - z_{C_i}) \frac{\partial}{\partial r} - r \frac{\partial}{\partial z} \right) + \sin \theta \frac{z - z_{C_i}}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \quad (\text{VII-71})$$

$$(\hat{\ell}_z)_{C_i} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}. \quad (\text{VII-72})$$

Quant à l'opérateur $\hat{\ell}_{C_i}^2$, on a :

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_{C_i}^2 = & -\hbar^2 \left[(z - z_{C_i})^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2(z - z_{C_i}) \left(r \frac{\partial^2}{\partial r \partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \right) \right. \\ & \left. - r \left(1 - \frac{(z - z_{C_i})^2}{r^2} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \left(1 + \frac{(z - z_{C_i})^2}{r^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{VII-73})$$

Entre deux états $|\varphi_{i'}^{(\Sigma_i)}\rangle$ et $|\varphi_{k'}^{(\Sigma_k)}\rangle$, avec les notations de l'eq. (VII-23), les éléments de matrice des quatre opérateurs (VII-70) à (VII-73) ainsi que de l'opérateur identité sont notés :

$$\langle \varphi_{i'}^{(\Sigma_i)} | \varphi_{k'}^{(\Sigma_k)} \rangle = I(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) \quad (\text{VII-74})$$

$$\langle \varphi_{i'}^{(\Sigma_i)} | (\hat{\ell}_\nu)_{C_i} | \varphi_{k'}^{(\Sigma_k)} \rangle = -i\hbar L^{(\nu)}(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) \quad \forall \nu \in \{x, y, z\} \quad (\text{VII-75})$$

$$\langle \varphi_{i'}^{(\Sigma_i)} | \hat{\ell}_{C_i}^2 | \varphi_{k'}^{(\Sigma_k)} \rangle = -\hbar^2 \mathcal{L}(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k). \quad (\text{VII-76})$$

Par développement de $|\varphi_{i'}^{(\Sigma_i)}\rangle$ et $|\varphi_{k'}^{(\Sigma_k)}\rangle$ sur la base de l'oscillateur harmonique notée brièvement $\{|\alpha, \Sigma\rangle\}$, on obtient :

$$I(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} (C_{\alpha_1 \Sigma_i}^{(i)})^* C_{\alpha_2 \Sigma_k}^{(k)} \langle \alpha_1 \Sigma_i | \hat{A}_\delta^2 | \alpha_2 \Sigma_k \rangle \quad (\text{VII-77})$$

$$L^{(\nu)}(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) = \frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} (C_{\alpha_1 \Sigma_i}^{(i)})^* C_{\alpha_2 \Sigma_k}^{(k)} \langle \alpha_1 \Sigma_i | \hat{A}_\delta (\hat{\ell}_\nu)_{C_i} \hat{A}_\delta | \alpha_2 \Sigma_k \rangle \quad (\text{VII-78})$$

$$\mathcal{L}(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} (C_{\alpha_1 \Sigma_i}^{(i)})^* C_{\alpha_2 \Sigma_k}^{(k)} \langle \alpha_1 \Sigma_i | \hat{A}_\delta \hat{\ell}_{C_i}^2 \hat{A}_\delta | \alpha_2 \Sigma_k \rangle \quad (\text{VII-79})$$

où les éléments de matrice dans la base $\{|\alpha \Sigma\rangle\}$ « pseudo-projetée » valent :

$$\langle \alpha_1 \Sigma_i | \hat{A}_\delta^2 | \alpha_2 \Sigma_k \rangle = \delta_{\Lambda_1 \Lambda_2} Z_{000}^{(A)} R_{000} \quad (\text{VII-80})$$

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \langle \alpha_1 \Sigma_i | \hat{A}_\delta (\hat{\ell}_x)_{C_i} \hat{A}_\delta | \alpha_2 \Sigma_k \rangle &= -S(\Lambda_1, \Lambda_2) (Z_{010}^{(A)} R_{001} - Z_{001}^{(A)} R_{010}) \\ &\quad - i\Lambda_2 C(\Lambda_1, \Lambda_2) Z_{010}^{(A)} R_{0-10} \end{aligned} \quad (\text{VII-81})$$

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \langle \alpha_1 \Sigma_i | \hat{A}_\delta (\hat{\ell}_y)_{C_i} \hat{A}_\delta | \alpha_2 \Sigma_k \rangle &= C(\Lambda_1, \Lambda_2) (Z_{010}^{(A)} R_{001} - Z_{001}^{(A)} R_{010}) \\ &\quad - i\Lambda_2 S(\Lambda_1, \Lambda_2) Z_{010}^{(A)} R_{0-10} \end{aligned} \quad (\text{VII-82})$$

$$\frac{i}{\hbar} \langle \alpha_1 \Sigma_i | \hat{A}_\delta (\hat{\ell}_z)_{C_i} \hat{A}_\delta | \alpha_2 \Sigma_k \rangle = \Lambda_2 \langle \alpha_1 \Sigma_i | \hat{A}_\delta^2 | \alpha_2 \Sigma_k \rangle \quad (\text{VII-83})$$

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\hbar^2} \langle \alpha_1 \Sigma_i | \hat{A}_\delta \hat{\ell}_{C_i}^2 \hat{A}_\delta | \alpha_2 \Sigma_k \rangle &= \delta_{\Lambda_1 \Lambda_2} \left(Z_{020}^{(A)} (R_{002} - \Lambda_1^2 R_{0-20} + R_{0-11}) + Z_{002}^{(A)} R_{020} \right. \\ &\quad \left. - Z_{000}^{(A)} (\Lambda_1^2 R_{000} + R_{011}) - 2 Z_{011}^{(A)} (R_{000} + R_{011}) \right). \end{aligned} \quad (\text{VII-84})$$

Dans les expressions (VII-80) à (VII-84), on a posé, en omettant les arguments :

$$Z_{ijk}^{(P)}(n_{z_1}, n_{z_2}; z_{C_i}) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{d^i}{dz^i} \left(F_\delta(z) \Psi_{n_{z_1}}(z) \right) (z - z_{C_1})^j \frac{d^k}{dz^k} \left(F_\delta(z) \Psi_{n_{z_2}}(z) \right) \quad (\text{VII-85})$$

$$Z_{ijk}^{(Q)}(n_{z_1}, n_{z_2}; z_{C_i}) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{d^i}{dz^i} \left(G_\delta(z) \Psi_{n_{z_1}}(z) \right) (z - z_{C_2})^j \frac{d^k}{dz^k} \left(G_\delta(z) \Psi_{n_{z_2}}(z) \right) \quad (\text{VII-86})$$

$$R_{ijk}(n_{r_1}, \Lambda_1; n_{r_2}, \Lambda_2) = \int_0^\infty dr r \frac{d^i \Psi_{n_{r_1}}^{\Lambda_1}}{dr^i} r^j \frac{d^k \Psi_{n_{r_2}}^{\Lambda_2}}{dr^k}, \quad (\text{VII-87})$$

ainsi que :

$$C(\Lambda_1, \Lambda_2) = \frac{1}{2} (\delta_{\Lambda_1 \Lambda_2+1} + \delta_{\Lambda_1 \Lambda_2-1}) \quad (\text{VII-88})$$

$$S(\Lambda_1, \Lambda_2) = \frac{1}{2i} (\delta_{\Lambda_1 \Lambda_2+1} - \delta_{\Lambda_1 \Lambda_2-1}). \quad (\text{VII-89})$$

Le calcul des intégrales $Z_{ijk}^{(A)}$ et R_{ijk} est détaillé dans les appendices VII.B et VII.C.

VII.A d Eléments de matrice de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}$ et $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2$

En notant :

$$U(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} (C_{\alpha_1 \Sigma_i}^{(i)})^* C_{\alpha_2 \Sigma_k}^{(k)} Z_{010}^{(A)} R_{0-10} \quad (\text{VII-90})$$

$$V(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} (C_{\alpha_1 \Sigma_i}^{(i)})^* C_{\alpha_2 \Sigma_k}^{(k)} (Z_{010}^{(A)} R_{001} - Z_{001}^{(A)} R_{010}), \quad (\text{VII-91})$$

on peut exprimer les éléments de matrice (VII-78) selon :

$$L^{(x)}(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) = -i\Lambda_k C(\Lambda_i, \Lambda_k) U(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) - S(\Lambda_i, \Lambda_k) V(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) \quad (\text{VII-92})$$

$$L^{(y)}(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) = -i\Lambda_k S(\Lambda_i, \Lambda_k) U(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) + C(\Lambda_i, \Lambda_k) V(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) \quad (\text{VII-93})$$

$$L^{(z)}(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) = i\Lambda_k I(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) . \quad (\text{VII-94})$$

Puisque

$$\langle i' | (\hat{j}_\nu)_{C_i} | k' \rangle = \sum_{\Sigma_1, \Sigma_2} \left(-i\hbar L^{(\nu)}(i', \Sigma_1; k', \Sigma_2) \langle \Sigma_1 | \Sigma_2 \rangle + I(i', \Sigma_1; k', \Sigma_2) \langle \Sigma_1 | \hat{s}_\nu | \Sigma_2 \rangle \right) , \quad (\text{VII-95})$$

et compte tenu des expressions des éléments de matrice de spin (VII-64) à (VII-66) et des relations (VII-92) à (VII-94), les éléments de matrice des composantes cartésiennes $(\hat{j}_\nu)_{C_i}$ de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}$ entre les états $|i'\rangle$ et $|k'\rangle$ prennent alors la forme :

$$\begin{aligned} \langle i' | (\hat{j}_x)_{C_i} | k' \rangle &= \frac{\hbar}{2} J^{(x)}(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) \\ &= \frac{\hbar}{2} \sum_{\Sigma} \left[I(i', \Sigma; k', -\Sigma) - \delta_{\Lambda_k \Lambda_{i+1}} (\Lambda_k U(i', \Sigma; k', \Sigma) + V(i', \Sigma; k', \Sigma)) \right. \\ &\quad \left. - \delta_{\Lambda_k \Lambda_{i-1}} (\Lambda_k U(i', \Sigma; k', \Sigma) - V(i', \Sigma; k', \Sigma)) \right] \end{aligned} \quad (\text{VII-96})$$

$$\begin{aligned} \langle i' | (\hat{j}_y)_{C_i} | k' \rangle &= -i \frac{\hbar}{2} J^{(y)}(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) \\ &= -i \frac{\hbar}{2} \sum_{\Sigma} \left[2 \Sigma I(i', \Sigma; k', -\Sigma) + \delta_{\Lambda_k \Lambda_{i+1}} (\Lambda_k U(i', \Sigma; k', \Sigma) + V(i', \Sigma; k', \Sigma)) \right. \\ &\quad \left. - \delta_{\Lambda_k \Lambda_{i-1}} (\Lambda_k U(i', \Sigma; k', \Sigma) - V(i', \Sigma; k', \Sigma)) \right] \end{aligned} \quad (\text{VII-97})$$

$$\begin{aligned} \langle i' | (\hat{j}_z)_{C_i} | k' \rangle &= \frac{\hbar}{2} J^{(z)}(i', \Sigma; k', \Sigma) \\ &= \frac{\hbar}{2} 2 \sum_{\Sigma} (\Sigma + \Lambda_k) I(i', \Sigma_i; k', \Sigma_k) \\ &= \frac{\hbar}{2} 2 \Omega_i \sum_{\Sigma} I(i', \Sigma; k', \Sigma) \alpha \delta_{\Omega_i \Omega_k} . \end{aligned} \quad (\text{VII-98})$$

Quant aux éléments de matrice (diagonaux) de $\hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2$, ils s'écrivent :

$$\begin{aligned} \langle i' | \hat{\mathbf{j}}_{C_i}^2 | i' \rangle &= \hbar^2 \sum_{\Sigma} \left[\left(\frac{3}{4} + 2 \Lambda_i \Sigma_i \right) I(i, \Sigma; i, \Sigma) - \mathcal{L}(i, \Sigma; i, \Sigma) \right. \\ &\quad \left. - \delta_{\Sigma 1/2} \left((\Omega_i + \Sigma) U(i', \Sigma; k', \Sigma) + V(i', \Sigma; k', \Sigma) \right) \right. \\ &\quad \left. - \delta_{\Sigma -1/2} \left((\Omega_i + \Sigma) U(i', \Sigma; k', \Sigma) - V(i', \Sigma; k', \Sigma) \right) \right] . \end{aligned} \quad (\text{VII-99})$$

VII.A e Renversement du temps

L'action de l'opérateur de renversement du temps \hat{t} sur un état d'oscillateur harmonique axial correspondant à une particule de spin $s = 1/2$ s'écrit :

$$\hat{t} |n_z \alpha \beta \Sigma\rangle \equiv |\overline{n_z \alpha \beta \Sigma}\rangle = (-1)^{-\Omega+1/2} |n_z \beta \alpha - \Sigma\rangle . \quad (\text{VII-100})$$

Soient $|k\rangle$ et $|\ell\rangle$ sont deux états propres de $(\hat{j}_z)_{C_i}$. Puisque ce dernier commute avec le pseudo-projecteur \hat{A}_δ , on peut montrer, en utilisant la propriété $[(\hat{j}_y)_{C_i}, (\hat{j}_z)_{C_i}] = i\hbar (\hat{j}_x)_{C_i}$, que :

$$(\Omega_k - \Omega_\ell) \langle k | \hat{A}_\delta (\hat{j}_y)_{C_i} \hat{A}_\delta | \ell \rangle = -i \langle k | \hat{A}_\delta (\hat{j}_x)_{C_i} \hat{A}_\delta | \ell \rangle . \quad (\text{VII-101})$$

On obtient donc pour $J^{(x)}(i', \Sigma_i; \bar{k}', \Sigma_{\bar{k}})$ et $J^{(y)}(i', \Sigma_i; \bar{k}', \Sigma_{\bar{k}})$:

$$J^{(x)}(i', \Sigma_i; \bar{k}', \Sigma_{\bar{k}}) = J^{(y)}(i', \Sigma_i; \bar{k}', \Sigma_{\bar{k}}) \quad (\text{VII-102})$$

$$\begin{aligned} &= \delta_{\Omega_i 1/2} \delta_{\Omega_k 1/2} \left\{ \sum_{\Sigma} 2\Sigma \left[\left(\Sigma + \frac{1}{2} \right) U(i', \Sigma; k', -\Sigma) + V(i', \Sigma; k', -\Sigma) \right] \right. \\ &\quad \left. - I\left(i', \frac{1}{2}; k', \frac{1}{2}\right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{VII-103})$$

et puisque \hat{A}_δ n'agit que sur z :

$$J^{(z)}(i', \Sigma_i; \bar{k}', \Sigma_{\bar{k}}) = 0 . \quad (\text{VII-104})$$

Appendice VII.B Calcul des intégrales $Z_{ijk}^{(A)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i})$

On rappelle la définition de l'intégrale $Z_{ijk}^{(P)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i})$:

$$Z_{ijk}^{(P)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i}) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{d^i}{dz^i} \left(F_{\delta}(z) \Psi_{n_{z_1}}(z) \right) (z - z_{C_i})^j \frac{d^k}{dz^k} \left(F_{\delta}(z) \Psi_{n_{z_2}}(z) \right). \quad (\text{VII-105})$$

On établit tout d'abord l'expression de cette intégrale dans le cas général, puis on applique la formule obtenue aux cas particuliers d'intérêt.

VII.B a Expression dans le cas général

Puisque la dérivée d'ordre m du produit $F_{\delta}(z) \Psi_{n_z}(z)$ peut être écrite sous la forme d'une somme grâce à la formule de Leibnitz :

$$\frac{d^m}{dz^m} (F_{\delta}(z) \Psi_{n_z}(z)) = \sum_{p=0}^m C_m^p \frac{d^{m-p} F_{\delta}}{dz^{m-p}} \frac{d^p \Psi_{n_z}}{dz^p}, \quad (\text{VII-106})$$

et en développant $(z - z_{C_i})^j$, on peut exprimer (VII-105) selon :

$$Z_{ijk}^{(P)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i}) = \sum_{p=0}^i \sum_{q=0}^k \sum_{m=0}^j C_i^p C_k^q C_j^m (-z_{C_i})^{j-m} \mathcal{Z}_{ip;m;kq}^{(P)}(n_{z_1}, n_{z_2}), \quad (\text{VII-107})$$

où l'on a posé :

$$\mathcal{Z}_{ip;m;kq}^{(P)}(n_{z_1}, n_{z_2}) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{d^{i-p} F_{\delta}}{dz^{i-p}} \frac{d^p \Psi_{n_{z_1}}}{dz^p} z^m \frac{d^{k-q} F_{\delta}}{dz^{k-q}} \frac{d^q \Psi_{n_{z_2}}}{dz^q}. \quad (\text{VII-108})$$

Exploitions maintenant la propriété des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique $\Psi_{n_z}(z)$, qui s'expriment, on le rappelle, comme :

$$\Psi_{n_z}(z) = \sqrt{\beta_z} N_{n_z} H_{n_z}(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (\text{VII-109})$$

avec $\xi = \beta_z z$. Dans l'annexe B, on établit que la dérivée d'ordre m de Ψ_{n_z} prend la forme (B-15) rappelée ci-après :

$$\frac{d^m \Psi_{n_z}}{dz^m} = \left(-\frac{\beta_z}{\sqrt{2}} \right)^m \sum_{k=0}^M C_m^k (-2)^k \sqrt{\frac{n_z!}{(n_z - k)!}} H_{m-k} \left(\frac{\xi}{\sqrt{2}} \right) \Psi_{n_z - k}(z), \quad (\text{VII-110})$$

où $M = \min(m, n_z)$. Par conséquent, l'intégrale (VII-108) prend la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{ip;m;kq}^{(P)}(n_{z_1}, n_{z_2}) = & \left(-\frac{\beta_z}{\sqrt{2}} \right)^{p+q} \sum_{\ell_1=0}^{M_1} C_p^{\ell_1} \sqrt{\frac{n_{z_1}!}{(n_{z_1} - \ell_1)!}} \sum_{\ell_2=0}^{M_2} C_q^{\ell_2} \sqrt{\frac{n_{z_2}!}{(n_{z_2} - \ell_2)!}} \times \\ & \Xi_{i-p, p-\ell_1; m; k-q, q-\ell_2}^{(P)}(n_{z_1} - \ell_1, n_{z_2} - \ell_2) \end{aligned} \quad (\text{VII-111})$$

avec $M_1 = \min(p, n_{z_1})$, $M_2 = \min(q, n_{z_2})$ et :

$$\begin{aligned} \Xi_{a\ell_1; m; b\ell_2}^{(P)}(n_z, n'_z) &= \int_{-\infty}^{\infty} dz z^m H_{\ell_1}\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right) H_{\ell_2}\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right) \frac{d^a F_\delta}{dz^a} \frac{d^b F_\delta}{dz^b} \Psi_{n_z}(z) \Psi_{n'_z}(z) \\ &= \frac{N_{n_z} N_{n'_z}}{\beta_z^m} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} \xi^m H_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) H_{\ell_1}\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right) H_{\ell_2}\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right) \frac{d^a F_\delta}{dz^a} \frac{d^b F_\delta}{dz^b}. \end{aligned} \quad (\text{VII-112})$$

On obtient évidemment l'expression relative au pseudo-projecteur \hat{Q}_δ en remplaçant F_δ par G_δ dans (VII-112). En reportant l'expression (VII-111) dans celle de $Z_{ijk}^{(A)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i})$ (VII-108), on aboutit à :

$$\begin{aligned} Z_{ijk}^{(A)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i}) &= \sum_{p=0}^i C_i^p \sum_{q=0}^k C_k^q \sum_{m=0}^j C_j^m (-z_{C_i})^{j-m} \left(-\frac{\beta_z}{\sqrt{2}}\right)^{p+q} \sum_{\ell_1=0}^{M_1} C_p^{\ell_1} (-2)^{\ell_1} \sqrt{\frac{n_{z_1}!}{(n_{z_1} - \ell_1)!}} \\ &\quad \sum_{\ell_2=0}^{M_2} C_q^{\ell_2} (-2)^{\ell_2} \sqrt{\frac{n_{z_2}!}{(n_{z_2} - \ell_2)!}} \Xi_{i-p\ p-\ell_1; m; k-q\ q-\ell_2}^{(A)}(n_{z_1} - \ell_1, n_{z_2} - \ell_2). \end{aligned} \quad (\text{VII-113})$$

VII.B b Calcul de $Z_{0j0}^{(A)}$, $Z_{0j1}^{(A)}$ et $Z_{0j2}^{(A)}$

Dans les expressions (VII-80) à (VII-84), les seules intégrales suivant z qui interviennent prennent la forme $Z_{0jk}^{(A)}$ avec $0 \leq k \leq 2$ et $0 \leq j \leq 2-k$. L'application directe de l'expression (VII-113) de $Z_{ijk}^{(A)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i})$ conduit à :

$$Z_{0j0}^{(A)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i}) = \sum_{m=0}^j C_j^m (-z_{C_i})^{j-m} \Xi_{00; m; 00}(n_{z_1}, n_{z_2}) \quad (\text{VII-114})$$

$$\begin{aligned} Z_{0j1}^{(A)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i}) &= \sum_{m=0}^j C_j^m (-z_{C_i})^{j-m} \left[\Xi_{00; m; 10}(n_{z_1}, n_{z_2}) - \frac{\beta_z}{\sqrt{2}} \left(\Xi_{00; m; 01}(n_{z_1}, n_{z_2}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2\sqrt{n_{z_2}} \Xi_{00; m; 00}(n_{z_1}, n_{z_2} - 1) \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{VII-115})$$

$$\begin{aligned} Z_{0j2}^{(A)}(n_{z_1}, n_{z_2}, z_{C_i}) &= \sum_{m=0}^j C_j^m (-z_{C_i})^{j-m} \left[\Xi_{00; m; 20}(n_{z_1}, n_{z_2}) - \sqrt{2} \beta_z \left(\Xi_{00; m; 11}(n_{z_1}, n_{z_2}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2\sqrt{n_{z_2}} \Xi_{00; m; 10}(n_{z_1}, n_{z_2} - 1) \right) + \frac{\beta_z^2}{2} \left(\Xi_{00; m; 02}(n_{z_1}, n_{z_2}) - 4\sqrt{n_{z_2}} \Xi_{00; m; 01}(n_{z_1}, n_{z_2} - 1) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 4\sqrt{n_{z_2}(n_{z_2} - 1)} \Xi_{00; m; 00}(n_{z_1}, n_{z_2} - 2) \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{VII-116})$$

Les intégrales $\Xi_{a\ell_1; m; b\ell_2}^{(P)}(n_z, n'_z)$ qui apparaissent dans (VII-114), (VII-115) et (VII-116) sont toutes telles que $a = \ell_1 = 0$, c'est-à-dire :

$$\Xi_{00; m; n\ell}^{(P)}(n_z, n'_z) = \beta_z^{-m} N_{n_z} N_{n'_z} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} \xi^m H_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) H_\ell\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right) F_\delta(z) \frac{d^n F_\delta}{dz^n}. \quad (\text{VII-117})$$

Elles sont calculées numériquement en deux temps. On procède tout d'abord à une interpolation spline cubique de l'intégrand sur un segment I de \mathbb{R} correspondant à son

support. En pratique, on choisit I tel que $z \in [-25; 25]$ (en fm), aux bornes duquel on a vérifié que l'intégrand était négligeable. Pour une interpolation suffisamment précise et compte tenu des brusques variations des dérivées de F_δ et G_δ (surtout quand δ devient de plus en plus petit, typiquement inférieur à 0.1 fm), nous avons subdivisé (ici régulièrement) I en 200 intervalles I_k environ. La deuxième étape consiste ensuite à intégrer la fonction d'interpolation par morceaux sur chaque intervalle I_k . Cette méthode présente l'avantage d'être de plus en plus précise à mesure que N augmente et de converger relativement vite, contrairement à la méthode de Gauss-Hermite dont nous avons constaté la baisse de précision à partir de 75 points environ. La qualité de la méthode retenue tient au fait que l'approximation réside uniquement dans l'interpolation, qui se révèle excellente dès que l'espacement entre les points (ici constant) devient comparable au minimum (en valeur absolue) du rayon de courbure sur l'ensemble de la courbe (de l'ordre du dixième de fermi).

Appendice VII.C Calcul des intégrales $R_{ijk}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda')$

On rappelle la définition de $R_{ijk}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda')$:

$$R_{ijk}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda') = \int_0^\infty dr r \frac{d^i \Psi_{n_r}^\Lambda}{dr^i} r^j \frac{d^k \Psi_{n'_r}^{\Lambda'}}{dr^k}. \quad (\text{VII-1})$$

Dans les expressions (VII-80) à (VII-84), les seules intégrales suivant r qui interviennent prennent l'une des trois formes R_{0j0} , R_{0j1} et R_{0j2} , avec $-2 \leq j \leq 2$.

VII.C a Calcul de R_{0j0}

Pour calculer l'intégrale R_{0j0} , on effectue le changement de variable $\eta = \beta_\perp^2 r^2$:

$$R_{0j0} = \frac{1}{\beta_\perp^j} N_{n_r}^\Lambda N_{n'_r}^{\Lambda'} \int_0^\infty d\eta \eta^{\frac{\Lambda + \Lambda' + j + 2}{2}} L_{n_r}^\Lambda(\eta) L_{n'_r}^{\Lambda'}(\eta) e^{-\eta}, \quad (\text{VII-2})$$

puis on utilise l'expression (B-8) des polynômes de Laguerre associés ainsi que celle (B-6) de la constante de normalisation $N_{n_r}^\Lambda$:

$$R_{0j0} = \frac{1}{\beta_\perp^j} \sqrt{n_r! n'_r! (n_r + \Lambda)! (n'_r + \Lambda')!} \sum_{k=0}^{n_r} \alpha_k(n_r, \Lambda) \sum_{k'=0}^{n'_r} \alpha_{k'}(n'_r, \Lambda') \int_0^\infty d\eta e^{-\eta} \eta^m \quad (\text{VII-3})$$

où l'on a posé $m = k + k' + (\Lambda + \Lambda' + j)/2$ et :

$$\alpha_k(n_r, \Lambda) = \frac{(-1)^k}{k! (n_r - k)! (\Lambda + k)!}. \quad (\text{VII-4})$$

L'intégrale dans (VII-3) est directement la fonction Γ d'Euler évaluée en $m + 1$:

$$\int_0^\infty d\eta e^{-\eta} \eta^m = \Gamma(m + 1) \quad (\text{VII-5})$$

donc R_{0j0} prend finalement la forme :

$$R_{0j0}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda') = \frac{1}{\beta_\perp^j} \sqrt{n_r! n'_r! (n_r + \Lambda)! (n'_r + \Lambda')!} \times \sum_{k=0}^{n_r} \frac{(-1)^k}{k! (n_r - k)! (\Lambda + k)!} \sum_{k'=0}^{n'_r} \frac{(-1)^{k'}}{k'! (n'_r - k')! (\Lambda' + k')!} \Gamma\left(\frac{\Lambda + \Lambda' + j}{2} + k + k' + 1\right). \quad (\text{VII-6})$$

L'argument de Γ étant entier ou demi-entier, on a explicitement :

$$\Gamma(m + 1) = \begin{cases} m! & \text{si } m \in \mathbb{N} \\ \frac{(2n)! \sqrt{\pi}}{2^{2n} n!} & \text{si } m = n - \frac{1}{2} \text{ avec } n \in \mathbb{N}. \end{cases} \quad (\text{VII-7})$$

VII.C b Calcul de R_{0j1} et R_{0j2}

Grâce aux propriétés des polynômes de Laguerre intervenant dans les fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique isotrope à deux dimensions (B-21) et (B-22), on peut exprimer R_{0j1} et R_{0j2} en fonction de R_{0j0} selon :

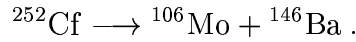
$$R_{0j1}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda') = (2n'_r + \Lambda') R_{0j-1,0}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda') - 2\sqrt{n'_r(n'_r + \Lambda')} R_{0j-1,0}(n_r, \Lambda; n'_r - 1, \Lambda') - \beta_\perp^2 R_{0j+1,0}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda') \quad (\text{VII-8})$$

$$\begin{aligned} R_{0j2}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda') &= 4\sqrt{n_r(n'_r - 1)(n_r + \Lambda')(n'_r + \Lambda' - 1)} R_{0j-2,0}(n_r, \Lambda; n'_r - 2, \Lambda') \\ &+ 2\sqrt{n'_r(n'_r + \Lambda')} \left[\left(3 - 2(2n'_r + \Lambda') \right) R_{0j-2,0}(n_r, \Lambda; n'_r - 1, \Lambda') + 2\beta_\perp^2 R_{0j0}(n_r, \Lambda; n'_r - 1, \Lambda') \right] \\ &+ (2n'_r + \Lambda')(2n'_r + \Lambda' - 1) R_{0j-2,0}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda') - \beta_\perp^2 \left(2(2n'_r + \Lambda') + 1 \right) R_{0j0}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda') \\ &+ \beta_\perp^4 R_{0j+2,0}(n_r, \Lambda; n'_r, \Lambda') . \end{aligned} \quad (\text{VII-9})$$

CHAPITRE VIII

Application du pompage orientationnel au spin des fragments de fission

Dans la section VI.2 du chapitre VI, nous avons particularisé une fragmentation pour pouvoir factoriser la fonction d'onde du noyau scindé en deux fragments. Afin de comparer nos résultats ci-dessous concernant cette fragmentation (primaire) avec les valeurs expérimentales de spin moyen, nous avons choisi l'une des plus probables parmi celles-ci. Dans la fission spontanée du ^{252}Cf , il s'agit de la fragmentation primaire



VIII.1 Calcul du spin des fragments par pompage orientationnel

Comme nous l'avons vu dans le chapitre VI, le modèle simple de la référence [48] que nous avons retenu implique que chaque fragment emporte la même quantité de moment angulaire notée J_{frag} telle que :

$$J_{\text{frag}} (J_{\text{frag}} + 1) = \langle J^2 \rangle \approx \left(\frac{1}{\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_1^{(\text{intr})}} + \frac{1}{\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_2^{(\text{intr})}} \right)^{-1} . \quad (\text{VIII-1})$$

Par ailleurs, d'après les résultats du chapitre VII, la non localité de l'opérateur $\hat{\mathbf{J}}^2$ entraîne l'existence d'un terme dit de recouvrement dans l'expression de sa valeur moyenne par rapport au centre de masse O du système fissionnant, qui ne se réduit pas uniquement à la somme des valeurs moyennes pour chaque fragment (hors termes de Koenig). On considère que ce terme de recouvrement est à partager entre chaque fragment en moyenne

au prorata de sa masse, autrement dit on ajoute à $\langle \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 \rangle_i^{(\text{intr})}$ la contribution au fragment i du recouvrement pour obtenir l'expression suivante de $\overline{\langle \hat{\mathbf{J}}_i^2 \rangle_{int}}$:

$$\overline{\langle \hat{\mathbf{J}}_i^2 \rangle_i^{(\text{intr})}} = \langle \hat{\mathbf{J}}_{C_i}^2 \rangle_i^{(\text{intr})} + \frac{A_i}{A} \langle \hat{\mathbf{J}}_O^2 \rangle_{\langle 1|2 \rangle} . \quad (\text{VIII-2})$$

Cette prescription restant toutefois arbitraire, on commet une erreur sur l'évaluation des $\langle \hat{\mathbf{J}}_i^2 \rangle_i^{(\text{intr})}$, donc sur J_{frag} , que l'on souhaite estimer. Pour cela, on part du fait que la quantité a définie comme la fraction de $\langle \hat{\mathbf{J}}_O^2 \rangle_{\langle 1|2 \rangle}$ attribuée au fragment 2 (fragment droit suivant notre convention) est une variable aléatoire pour laquelle on propose la loi de probabilité suivante à titre d'exemple :

$$P(a) = \begin{cases} \frac{2a}{a_0} & \text{si } 0 \leq a \leq a_0 \\ 2 \frac{a-1}{a_0-1} & \text{si } a_0 \leq a \leq 1 \end{cases} . \quad (\text{VIII-3})$$

Le paramètre a_0 est fixé par la valeur moyenne de a :

$$a_0 = 3\bar{a} - 1 , \quad (\text{VIII-4})$$

que l'on impose égale à :

$$\bar{a} = \frac{A_2}{A} . \quad (\text{VIII-5})$$

Puisque a_0 doit être compris entre 0 et 1, cette loi de probabilité n'a un sens que pour des fragmentations « relativement » équilibrées, c'est-à-dire $1/3 \leq \bar{a} \leq 2/3$. La variance de a , notée α , vérifie alors la relation :

$$\alpha^2 = \frac{1}{18} \left(1 + a_0(a_0 - 1) \right) = \frac{1}{6} \left(1 - 3 \frac{A_1 A_2}{A^2} \right) , \quad (\text{VIII-6})$$

dont on remarque aussitôt la symétrie dans l'échange de a_0 en $1 - a_0$, c'est-à-dire en permutant A_1 et A_2 . La variance se révèle maximale pour une fragmentation symétrique ($\bar{a} = 1/2$) et minimale pour la fragmentation la plus asymétrique que l'on puisse considérer ($\bar{a} = 1/3$ ou $\bar{a} = 2/3$).

On souhaite maintenant estimer l'erreur ΔJ_{frag} sur J_{frag} . Afin d'alléger l'écriture, on adopte les notations suivantes :

$$x_i = \langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_i^{(\text{intr})} \quad R = \langle \hat{\mathbf{J}}_O^2 \rangle_{\langle 1|2 \rangle} \quad x = \langle J^2 \rangle . \quad (\text{VIII-7})$$

Calculons la différentielle de $J_{\text{frag}}(J_{\text{frag}} + 1)$:

$$(2J_{\text{frag}} + 1) dJ_{\text{frag}} = \frac{1}{x_1 + x_2} [(x_2 - x)dx_1 + (x_1 - x)dx_2] . \quad (\text{VIII-8})$$

Or la résolution de l'équation du second degré $J_{\text{frag}}(J_{\text{frag}} + 1) = x$ d'inconnue $J_{\text{frag}} > 0$ conduit à la relation :

$$2J_{\text{frag}} + 1 = \sqrt{1 + 4x} . \quad (\text{VIII-9})$$

De plus, les différentielles de x_1 et de x_2 ne sont pas indépendantes car

$$x_1 + x_2 = \langle \hat{J}_O^2 \rangle - \left(\langle \hat{\mathbf{J}}_{C_1}^2 \rangle_1^{(K)} + \langle \hat{\mathbf{J}}_{C_2}^2 \rangle_2^{(K)} \right) \quad (\text{VIII-10})$$

est une constante en ce sens que l'on ne commet pas d'erreur sur l'estimation de cette quantité car chaque contribution est bien définie. Par conséquent, il vient :

$$dx_1 + dx_2 = 0 . \quad (\text{VIII-11})$$

Pour pouvoir estimer ΔJ_{frag} , on assimile les valeurs absolues de dx_1 et dx_2 à la variance de la contribution du terme de recouvrement à chaque fragment :

$$|dx_1| = |dx_2| = \alpha R \quad (\text{VIII-12})$$

et on suppose que cette quantité est assez petite pour identifier ΔJ_{frag} avec la valeur absolue de la différentielle de J_{frag} , d'où l'expression cherchée :

$$\Delta J_{\text{frag}} = \alpha R \frac{x}{\sqrt{1+4x}} \frac{|x_1 - x_2|}{x_1 x_2} . \quad (\text{VIII-13})$$

VIII.2 Energie d'excitation totale des fragments et multiplicité totale des neutrons de post-scission

On cherche tout d'abord à calculer l'énergie d'excitation avec laquelle les fragments sont formés et à estimer ensuite le nombre total de neutrons émis par ces derniers.

VIII.2 a Energie d'excitation totale des fragments

Puisqu'à la scission le noyau fissionnant est scindé en deux fragments, l'énergie totale de configuration de scission $E_{\text{sc}}^{(\text{tot})}$ s'écrit :

$$E_{\text{sc}}^{(\text{tot})} = E_{\text{sc}}^{(\text{mut})} + \sum_{k=1}^2 E_{\text{sc}}^{(k)} \quad (\text{VIII-14})$$

où $E_{\text{sc}}^{(k)}$ est l'énergie du fragment k et $E_{\text{sc}}^{(\text{mut})}$ l'énergie d'interaction entre les deux fragments. On fait l'approximation que cette dernière peut être assimilée à l'énergie coulombienne mutuelle $E_{\text{coul}}^{(\text{mut})}$ pour des interdistances d assez grandes devant la portée de l'interaction nucléaire forte :

$$E_{\text{sc}}^{(\text{mut})} \approx E_{\text{coul}}^{(\text{mut})} . \quad (\text{VIII-15})$$

Toutefois, cela reste quelque peu ambigu dans la mesure où le calcul de l'énergie fait intervenir la partie non locale de la matrice densité à un corps, soit par l'intermédiaire des termes de Fock (dus au principe de Pauli), soit directement à cause de la non localité d'un opérateur contribuant au hamiltonien (comme l'énergie cinétique ou le potentiel spin-orbite à deux corps).

On peut aussi exprimer $E_{\text{sc}}^{(\text{tot})}$ en fonction de Q_f , la chaleur de réaction de fission définie par :

$$Q_f = E_{\text{ini}}^{(\text{tot})} - \sum_{k=1}^2 E_{\text{fin}}^{(k)} , \quad (\text{VIII-16})$$

où $E_{\text{ini}}^{(\text{tot})}$ est l'énergie du noyau fissionnant initialement dans son état fondamental, et $E_{\text{fin}}^{(k)}$ l'énergie du fragment k dans l'état final (son état fondamental). En effet, on peut décomposer $E_{\text{sc}}^{(\text{tot})}$ selon :

$$E_{\text{sc}}^{(\text{tot})} = E_{\text{sc}}^{(\text{tot})} - E_{\text{ini}}^{(\text{tot})} + Q_f + \sum_{k=1}^2 E_{\text{fin}}^{(k)}. \quad (\text{VIII-17})$$

Or les deux premiers termes du membre de droite de l'expression (VIII-17) constituent l'énergie relative de déformation du système fissionnant par rapport à son état fondamental :

$$E_{\text{def}}^{(\text{tot})} = E_{\text{sc}}^{(\text{tot})} - E_{\text{ini}}^{(\text{tot})}, \quad (\text{VIII-18})$$

donc en égalant les expressions (VIII-14) et (VIII-17) on obtient :

$$\sum_{k=1}^2 (E_{\text{sc}}^{(k)} - E_{\text{fin}}^{(k)}) = E_{\text{def}}^{(\text{tot})} + Q_f - E_{\text{coul}}^{(\text{mut})}. \quad (\text{VIII-19})$$

Le membre de gauche de l'expression (VIII-19) n'est autre que l'énergie relative de déformation des fragments par rapport à leur état fondamental, notée $E_{\text{def}}^{(\text{fr})}$. En faisant l'approximation que l'énergie d'excitation des fragments provient uniquement de l'énergie de déformation, l'expression cherchée de E^* est par conséquent :

$$E^* \approx E_{\text{def}}^{(\text{fr})} = E_{\text{def}}^{(\text{tot})} + Q_f - E_{\text{coul}}^{(\text{mut})}. \quad (\text{VIII-20})$$

Cette approximation a notamment été considérée par R. Vandenbosch dans son modèle de scission [110] puis beaucoup plus récemment par Ş. Mişicu et P. Quentin pour leur étude semi-microscopique de configurations de scission dans la fission froide du ^{252}Cf [108].

En pratique, on utilise les énergies de liaison expérimentales¹ $B^{(\text{exp})}(A, Z)$ issues de la table de masses de G. Audi et A. H. Wapstra [130] pour calculer la valeur de Q_f :

$$Q_f((A_{\text{tot}}, Z_{\text{tot}}) \rightarrow (A_1, Z_1) + (A_2, Z_2)) = B^{(\text{exp})}(A_1, Z_1) + B^{(\text{exp})}(A_2, Z_2) - B^{(\text{exp})}(A_{\text{tot}}, Z_{\text{tot}}). \quad (\text{VIII-23})$$

¹Nous avons effectué également le calcul de Q_f à partir des énergies de déformation au fondamental de chacun des trois noyaux impliqués :

$$Q_f^{(th)} = E_{GS}(^{252}\text{Cf}) - E_{GS}(^{106}\text{Mo}) - E_{GS}(^{146}\text{Ba}) \quad (\text{VIII-21})$$

et avons trouvé $Q_f^{(th)} = 227.39$ MeV, c'est-à-dire 10 MeV de plus que la valeur expérimentale. Cet excès peut s'expliquer par le fait que la force effective SkM* surestime l'énergie de liaison davantage dans les noyaux de masse moyenne riches en neutrons que dans les noyaux lourds proches de la vallée de stabilité β (voir la table 2 de la référence [42]). D'autre part, dans le calcul de $E_{\text{def}}^{(\text{tot})}$, nous avons inclu la correction approchée de l'énergie cinétique du centre de masse selon l'expression (I-34) avec $A = 252$ alors que les fragments sont bien séparés rendant mauvaise l'approximation (I-34) dans une configuration de scission. Une valeur du dénominateur de la correction du centre de masse plus réaliste serait $A/2$, ce qui conduirait à une valeur de l'énergie cinétique corrigée, donc de l'énergie de déformation $E_{\text{def}}^{(\text{tot})}$, inférieure à celle que nous avons prise en compte dans les calculs actuels (de l'ordre de 10 MeV), de telle sorte qu'un calcul de E^* complet et plus réaliste donnerait :

$$E_{th}^* = (E_{\text{def}}^{(\text{tot})})_{\text{real}} + Q_f^{(th)} + E_{\text{coul}}^{(\text{mut})} \approx (E_{\text{def}}^{(\text{tot})})_{\text{actuel}} + Q_f^{(exp)} + E_{\text{coul}}^{(\text{mut})}. \quad (\text{VIII-22})$$

Autrement dit, les deux effets (évaluation de Q_f par nos calculs plutôt qu'à partir des valeurs expérimentales des énergies de liaison et prise en compte plus réaliste de la correction du centre de masse) se compensent (au moins partiellement).

Pour la fragmentation étudiée en guise d'exemple dans cette thèse, on obtient :

$$Q_f(^{252}\text{Cf} \longrightarrow ^{106}\text{Mo} + ^{146}\text{Ba}) = 217.391 \text{ MeV} . \quad (\text{VIII-24})$$

A ce stade, il convient de souligner que le calcul de l'énergie d'excitation totale E^* , supposée n'exister que sous forme d'énergie de déformation, n'est pas dépourvu d'ambiguïté. En effet, pour une valeur fixée de E^* et pour une répartition donnée de cette énergie d'excitation entre les deux fragments, supposés posséder la symétrie axiale, on peut prévoir que plusieurs couples de déformations $(Q_{20}^{(1)}, Q_{20}^{(2)})$ conduiront à la même énergie d'excitation E^* . Celles-ci sont solutions des deux équations couplées :

$$E_{\text{def}}^{(k)}(Q_{20}^{(1)}, Q_{20}^{(2)}) = E_k^* \quad k \in \{1; 2\} \quad (\text{VIII-25})$$

avec

$$E_{\text{def}}^{(k)}(Q_{20}^{(1)}, Q_{20}^{(2)}) = E_{\text{sc}}^{(k)}(Q_{20}^{(1)}, Q_{20}^{(2)}) - E_{\text{fin}}^{(k)}(Q_{20}^{(k)}) \quad (\text{VIII-26})$$

$$E_1^* + E_2^* = E^* . \quad (\text{VIII-27})$$

Pour illustrer cet argument, nous avons représenté sur la figure VIII.1 les courbes d'énergie de déformation des fragments primaires ^{106}Mo et ^{146}Ba calculées séparément lorsque ces derniers sont isolés, c'est-à-dire, pour chaque fragment, en l'absence du champ coulombien exercé par l'autre partenaire de fission. A cette énergie appelée $E_{\text{isol}}^{(1)}(Q_{20}^{(1)})$ pour le fragment 1, il faut ajouter le terme de polarisation du champ coulombien créé par le fragment 2 noté $\delta E_{\text{coul}}(2)$ pour reconstituer l'énergie $E_{\text{sc}}^{(1)}$ du fragment 1 à la scission :

$$E_{\text{sc}}^{(1)} = E_{\text{isol}}^{(1)}(Q_{20}^{(1)}) + \delta E_{\text{coul}}(2) . \quad (\text{VIII-28})$$

On obtient évidemment de façon similaire :

$$E_{\text{sc}}^{(2)} = E_{\text{isol}}^{(2)}(Q_{20}^{(2)}) + \delta E_{\text{coul}}(1) . \quad (\text{VIII-29})$$

La présence du terme $\delta E_{\text{coul}}(2)$ ne modifie pas le fait qu'à $E_1^* > 0$ fixé, il existe au moins deux déformations possibles pour le fragment 1 comme on peut le voir sur la figure VIII.1 (idem pour le fragment 2). En pratique les énergies d'excitation totales considérées sont suffisantes pour ne donner lieu qu'à deux déformations possibles pour chaque fragment et nous n'avons pris en compte qu'un seul couple de solutions parmi les quatre possibles. Toutefois, en émettant l'hypothèse les courbes d'énergie de déformation et de $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_{\text{intr}}$ sont approximativement symétriques par rapport à la droite d'équation $Q_{20} = 0$, on en déduit que les quatre couples $(Q_{20}^{(1)}, Q_{20}^{(2)})$ conduiraient à des valeurs assez voisines de $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_1^{(\text{intr})}$ d'une part, $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle_2^{(\text{intr})}$ d'autre part, donc de J_{frag} d'après la relation (VIII-1).

La situation se compliquerait si au lieu d'une seule variable supposée pertinente $Q_{20}^{(k)}$ on en introduisait d'autres, comme $Q_{30}^{(k)}$ par exemple. L'ambiguïté discutée ci-dessus serait partiellement levée si l'on avait des arguments forts pour décider de la partition en énergie d'excitation ou si on en connaissait une distribution réaliste.

VIII.2 b Multiplicité totale des neutrons de post-scission

Intéressons-nous maintenant à la désexcitation des fragments. Ceux-ci décroissent par émission de neutrons tant que le fragment résultant de l'émission d'un neutron possède

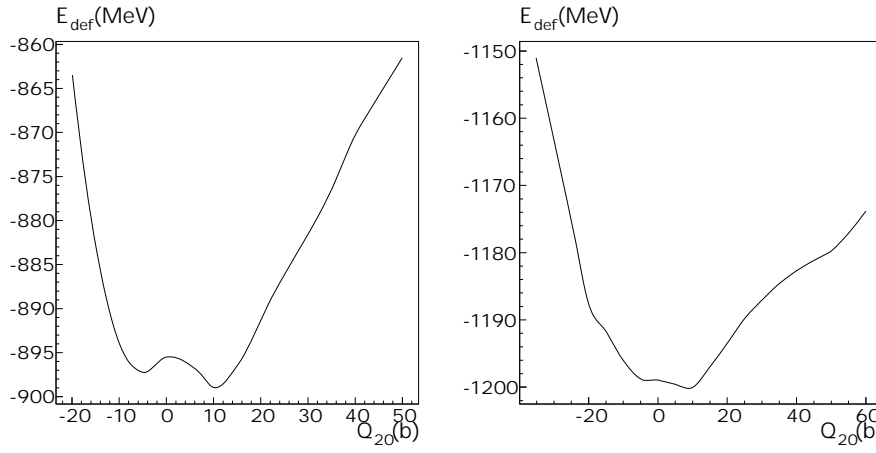


Figure VIII.1 — Courbes d'énergie de déformation à symétries de révolution et de réflexion des fragments primaires considérés dans ce chapitre (^{106}Mo à gauche et ^{146}Ba à droite), obtenues avec $N_0 = 12$ et les paramètres de base b et q déduits du modèle de la goutte liquide (voir les expressions de b et q dans la référence [79]).

une énergie d'excitation supérieure à l'énergie de séparation d'un neutron pour ce fragment, le reste de l'énergie étant libéré par émission γ . Le modèle qui va suivre repose essentiellement sur trois hypothèses. L'énergie coulombienne mutuelle est tout d'abord supposée être totalement convertie en énergie cinétique des fragments. Ensuite on néglige l'énergie cinétique de pré-scission dans la direction de fission. Cette dernière est à l'heure actuelle une quantité encore très mal connue. L'énergie cinétique totale est donc égale à l'énergie coulombienne mutuelle. Ces deux hypothèses ont déjà été avancées par Wilkins *et al.* dans leur modèle du point de scission fondé sur des effets de couches déformées [106]. Nous supposons également négligeable l'émission de neutrons de pré-scission à basse énergie d'excitation (qui est le régime que nous considérons ici), bien que Kapoor *et al.* aient attribué l'origine des 10 % de neutrons environ émis de façon isotrope dans le référentiel du laboratoire à l'émission de pré-scission [131]. De même, nous ne tenons pas compte de l'émission de neutrons de scission dont la contribution à l'émission totale de neutrons dans la fission spontanée du ^{252}Cf (qui a fait l'objet de nombreuses études expérimentales) est encore controversée [132]. Selon les études, cette contribution varie de 1 à 13 % (voir la série de références [133]). Ajoutons que Kornilov et collaborateurs ont mesuré un excès d'émission de neutrons d'environ 30 % à 90° de la direction de fission, qu'ils attribuent aux neutrons de scission [134]. Ainsi l'énergie d'excitation d'un fragment primaire, dont nous avons supposé qu'elle provenait uniquement de l'énergie de déformation des fragments, est dépensée en émission de neutrons puis de photons selon :

$$E_{\text{exc}}^{(k)} = \sum_{\nu=1}^{\nu_{\text{tot}}} \left(E_{\text{sep}}^{(k,\nu)} + E_{\text{kin}}^{(n)} \right) + E_{\gamma} \quad (\text{VIII-30})$$

où $E_{\text{sep}}^{(k,\nu)}$ est l'énergie de séparation avant émission du $\nu^{\text{ième}}$ neutron du fragment k , $E_{\text{kin}}^{(n)}$ l'énergie cinétique emportée par un neutron émis et E_{γ} l'énergie des photons émis.

Afin d'obtenir une relation approchée entre la multiplicité totale ν_{tot} et l'énergie totale d'excitation, on retient les estimations suivantes. En raison du caractère riche en neutrons

des fragments, l'énergie de séparation des neutrons $E_{\text{sep}}^{(k,\nu)}$ est plutôt faible et on considère qu'en moyenne elle vaut :

$$\overline{E_{\text{sep}}^{(k,\nu)}} \approx 5.5 \text{ MeV} . \quad (\text{VIII-31})$$

De plus, le spectre d'énergie des neutrons d'évaporation dans le référentiel du centre de masse du fragment émetteur est généralement supposé avoir une forme maxwellienne [132] (donnant un spectre de Watt dans le référentiel du laboratoire [135] si les fragments ont tous la même énergie cinétique par nucléon) avec :

$$\overline{E_{\text{kin}}^{(n)}} \approx 1.5 \text{ MeV} . \quad (\text{VIII-32})$$

Enfin, l'énergie des rayons γ étant comprise entre 0 et $E_{\text{sep}}^{(k,\nu)}$, on suppose qu'elle vaut approximativement la moyenne (arithmétique) de ces deux valeurs extrêmes, ce qui revient par exemple à supposer équiprobables toutes les valeurs intermédiaires entre 0 et $E_{\text{sep}}^{(k,\nu)}$:

$$\overline{E_{\gamma}} \approx \frac{\overline{E_{\text{sep}}^{(k,\nu)}}}{2} = 2.5 \text{ MeV} . \quad (\text{VIII-33})$$

Cela nous donne une relation approchée entre l'énergie d'excitation du fragment k ci-dessus et le nombre de neutrons $\overline{\nu_k}$ émis par ce dernier :

$$\overline{\nu_k} \approx \frac{E_{\text{exc}}^{(k)} - 2.25}{7.0} \quad (\text{VIII-34})$$

où $E_{\text{exc}}^{(k)}$ s'exprime en MeV. Puisque $E^* = E_{\text{exc}}^{(1)} + E_{\text{exc}}^{(2)}$ par définition, en sommant sur les deux fragments, on obtient la multiplicité totale moyenne de neutrons $\overline{\nu_{\text{tot}}}$ cherchée :

$$\overline{\nu_{\text{tot}}} \approx \frac{E^* - 5.5}{7.0} \quad (\text{VIII-35})$$

avec E^* en MeV. Il est à noter qu'une relation simple de cette forme a également été utilisée récemment par H. Faust dans le cadre d'un modèle statistique de calcul d'énergie d'excitation [136]. A la différence de notre approche ci-dessus dans laquelle l'énergie d'excitation est stockée sous forme d'énergie de déformation à température nulle, ce modèle suppose qu'après la fission les fragments sont thermiquement excités à une température proportionnelle à la chaleur de réaction Q_f . La valeur moyenne (au sens statistique) de l'énergie d'excitation est de la forme :

$$\overline{E^*} = a (c Q_f)^2 \quad (\text{VIII-36})$$

où $c Q_f = k_B T$ est la température (en unité de la constante de Boltzmann k_B) et a le paramètre de densité de niveaux (qui permet de tenir compte des effets de couches, sphériques ou déformées). L'auteur de la référence [136] a alors montré que la proportion c de Q_f utilisée pour porter les fragments à la température finale T est indépendante du noyau composé et de la fragmentation considérée et que l'on pouvait bien reproduire les données expérimentales d'énergie d'excitation, d'énergie cinétique et de multiplicité de neutrons à partir d'une distribution de probabilité d'excitation exponentielle de la forme $\exp(-E^*/\overline{E^*})$.

VIII.3 Résultats et discussion

Le modèle de génération de moment angulaire par pompage orientationnel du chapitre VI et le modèle de scission présenté dans les sections précédentes ont été appliqués à la fragmentation primaire $^{252}\text{Cf} \longrightarrow ^{106}\text{Mo} + ^{146}\text{Ba}$ ², qui est l'une des plus probables et qui est voisine de celles considérées expérimentalement par Ter Akopian *et al.* [47]. A une interdistance d fixée, nous avons effectué le calcul du spin des fragments J_{frag} pour différentes valeurs de l'énergie d'excitation E^* . Celles-ci ont été obtenues en faisant varier l'énergie de déformation des fragments par une double contrainte sur leurs moments quadripolaires $Q_{20}^{(1)}$ et $Q_{20}^{(2)}$. En pratique, les premières solutions de ce problème variationnel fortement contraint qui ont été trouvées correspondent à $d = 4.67$ fm. Les résultats issus de ces premiers calculs sont reportés dans le tableau VIII.1 et représentés sur la figure VIII.2.

Tableau VIII.1 — *Multiplicité totale moyenne des neutrons et spin des fragments de fission (et son incertitude) pour la fragmentation $^{252}\text{Cf} \longrightarrow ^{106}\text{Mo} + ^{146}\text{Ba}$ en fonction de l'énergie d'excitation E^* des fragments, à une interdistance fixée à $d = (4.67 \pm 0.02)$ fm.*

$E^*(\text{MeV})$	$\overline{\nu_{\text{tot}}}$	$J_{\text{frag}} (\hbar)$
19.49	2.0	1.36 ± 0.01
21.70	2.3	2.80 ± 0.20
29.81	3.4	6.37 ± 0.01
39.06	4.7	8.24 ± 0.02
48.69	6.0	9.43 ± 0.04

²Les nombres de protons et de neutrons dans le fragment lourd ont été fixés en valeur moyenne à un nombre entier. Il existe donc des fluctuations autour de la fragmentation moyenne $^{106}\text{Mo} + ^{146}\text{Ba}$.

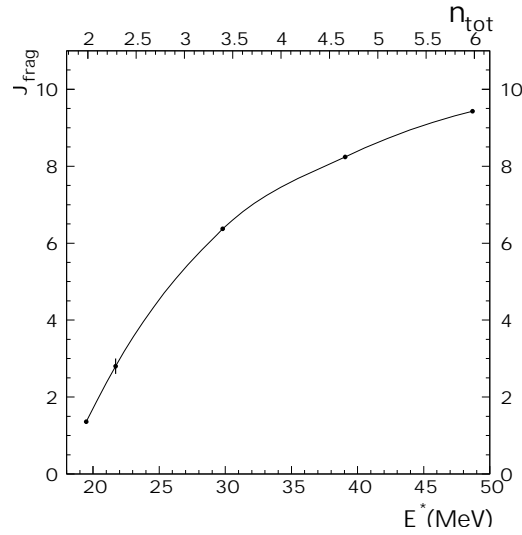


Figure VIII.2 — Courbe de variation de J_{frag} (en unités d' \hbar) en fonction de l'énergie d'excitation totale et de la multiplicité totale de neutrons de post-scission. Les barres d'erreur sur J_{frag} sont en général invisibles à cette échelle, excepté pour le point à 21.70 MeV.

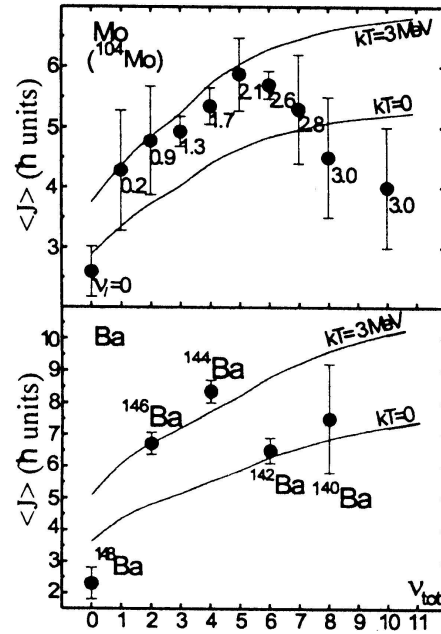


Figure VIII.3 — Valeurs expérimentales du moment angulaire moyen des fragments primaires de Mo (partie supérieure) et de Ba (partie inférieure) en fonction du nombre total de neutrons prompts ν_{tot} correspondant à des événements de fission spontanée du ^{252}Cf où le fragment secondaire léger est le noyau ^{104}Mo (reproduction de la figure 2 de la référence [47]).

La courbe de la figure VIII.2 montre que J_{frag} est une fonction croissante et concave

de $\overline{\nu_{\text{tot}}}$ jusqu'à 6 neutrons émis. Ces résultats se révèlent plutôt satisfaisants comme le montre la comparaison suivante avec les données expérimentales de Ter Akopian *et al.* sur la figure VIII.3. Ces auteurs ont considéré les fragmentations secondaires de ^{104}Mo et de Ba avec différents valeurs du nombre total de neutrons émis et pour lesquelles ils ont mesuré le spin des fragments (secondaires). Par une procédure de déconvolution reposant sur plusieurs hypothèses simplificatrices (voir la référence [46]), ils déduisent le nombre moyen de neutrons émis par chaque fragment et peuvent ainsi reconstruire la fragmentation primaire moyenne (il s'agit en fait d'une distribution de fragmentations primaires donnant une fragmentation secondaire $^{104}\text{Mo}+\text{Ba}$ à ν_{tot} fixé). En faisant l'hypothèse que chaque neutron émis emporte un moment angulaire valant $0.5 \hbar$, ils peuvent ainsi estimer la valeur moyenne du spin des fragments primaires. C'est précisément cette quantité qui est représentée en fonction de ν_{tot} sur la figure VIII.3, la partie supérieure correspondant aux fragments primaires de Mo conduisant au ^{104}Mo après émission de ν_l neutrons en moyenne et la partie inférieure à ceux de Ba émettant par conséquent $\nu_h = \nu_{\text{tot}} - \nu_l$ (en moyenne également). Les isotopes pairs de Ba apparaissant sur la figure sont en fait les fragments secondaires lourds, tandis que les valeurs indiquées à côté de chaque point de la partie supérieure sont les valeurs moyennes de ν_l . Par conséquent, la fragmentation primaire (non entière car il s'agit d'une moyenne) à ν_{tot} (donc ν_l) donné est $^{104+\nu_l}\text{Mo}+^{148-\nu_l}\text{Ba}$ et varie tout au long de la courbe $J_{\text{frag}}(\nu_{\text{tot}})$. Elle ne peut donc être directement comparée à nos résultats où la fragmentation primaire a été imposée. Toutefois, cette dernière restant assez voisine de celles correspondant aux données expérimentales de la figure VIII.3, on peut quand même considérer que l'allure croissante et saturante observée sur cette figure reflète celle que l'on obtient dans nos calculs de J_{frag} en fonction de ν_{tot} pour la fragmentation primaire $^{106}\text{Mo}+^{146}\text{Ba}$. En outre, selon une étude de S. C. Wu et collaborateurs [137], les données de la référence [47] sont erronées au-delà de 6 neutrons environ. Nous devons donc limiter notre comparaison à l'intervalle $[0; 6]$ pour ν_{tot} , en gardant à l'esprit que les données expérimentales correspondent à différentes fragmentations primaires. En outre, nous pouvons retenir que, globalement, nous obtenons un ordre de grandeur raisonnable pour J_{frag} compte tenu des hypothèses faites dans notre modèle (Cf. chapitre VI). Le mécanisme de pompage orientationnel semble donc capable à lui seul de fournir l'essentiel du moment angulaire des fragments, tout au moins à basse énergie d'excitation. Les autres mécanismes, en particulier l'excitation thermique de modes collectifs (comme le mode de bending), ne jouent alors apparemment qu'un rôle correctif, de moins en moins important à mesure que l'énergie d'excitation diminue³.

Très récemment, T. M. Shneidman, G. G. Adamian et collaborateurs ont étudié le rôle du mode de bending dans la génération de moment angulaire des fragments de fission en s'appuyant sur le modèle DNS [109]. Dans cette étude dynamique, ils définissent la température de chaque fragment de façon approximative comme la moitié de l'énergie cinétique du fragment et supposent qu'au voisinage de la scission le système di-nucléaire atteint un équilibre thermique, dans lequel la probabilité d'occupation des états de bending prend la forme exponentielle d'un facteur de Boltzmann. Ces auteurs obtiennent des valeurs de température relativement basses (environ 0.7 MeV pour la fragmentation considérée ici) qui conduisent à des valeurs de spin pour les fragments compatibles avec l'expérience. De telles températures sont associées à des valeurs de $\hbar\omega_{\text{bending}}$ de l'ordre de 0.8 MeV, plus faibles que celles de M. Zielinska-Pfabé et K. Dietrich [44]. Toutefois, la justification d'une

³Nous remercions vivement F. Gönnerwein pour son aide précieuse à la compréhension des résultats expérimentaux de la référence [47].

telle valeur pour l'énergie d'un phonon de bending ne semble pas clairement établie.

Plus récemment, I. N. Mikhaïlov, C. Briançon et P. Quentin [138] ont montré qu'à partir des hypothèses dynamiques du modèle DNS, on retrouve les résultats obtenus par les auteurs de la référence [48]. Or le mécanisme de pompage orientationnel n'implique pas de dynamique, donc c'est sa structure quantique sous-jacente qui est à l'origine de la génération de moment angulaire dans les fragments de fission à basse énergie.

CONCLUSIONS — PERSPECTIVES

Les travaux effectués dans cette thèse se sont déroulés essentiellement en deux étapes. Dans un premier temps, une attention toute particulière a été portée à la précision des intégrations le long de la direction de fission par la méthode de Gauss-Hermite. Ceci nous a permis une description satisfaisante des noyaux jusqu'à des déformations supérieures à celles accessibles dans les calculs HF antérieurs avec la force de Skyrme. De plus, le code HF+BCS à symétrie axiale a été étendu de manière à pouvoir inclure dans la base de décomposition des fonctions d'onde individuelles des polynômes plus adaptés aux configurations à deux fragments que ceux d'Hermite, et a également été étendu aux formes non symétriques de réflexion droite-gauche en brisant la symétrie de parité. Les barrières de fission de 26 noyaux lourds du ^{230}Th au ^{256}No ont été calculées et comparées aux données expérimentales disponibles. Globalement, nous avons obtenu un accord raisonnable, avec des différences d'au plus 1 MeV en général. En particulier, nos calculs mettent en lumière une nette corrélation entre la variation des temps de vie expérimentaux de fission des isotopes pairs du Fermium et celle des hauteurs calculées des secondes barrières. Ils sont de plus capables de reproduire le puits hyper-déformé observé expérimentalement dans l'isotope ^{230}Th avec un bon accord pour sa profondeur.

Dans un deuxième temps, forts de ce succès, nous avons porté notre étude au-delà du deuxième point-selle et nous sommes intéressés à la région de la scission. Sur le plan technique, il a fallu d'abord définir les fragments par une projection adoucie sur les demi-espaces situés de part et d'autre d'un plan de séparation. Nous avons ensuite pu procéder à des calculs HF fortement contraints afin d'explorer différentes fragmentations (nombre de nucléons dans les fragments imposés en moyenne), différentes formes de fragments (en imposant leur moment quadrupolaire axial calculé par rapport à leur centre de masse), les placer à différentes distances (en contraignant l'opérateur représentant la distance entre les centres de masse), tout en s'assurant que le centre de masse du système total restait fixe (par une contrainte sur la valeur moyenne de z). Nous avons également montré que la base de l'oscillateur harmonique offrait une description raisonnable de telles configurations en la comparant avec les résultats obtenus avec notre code utilisant une base à deux centres. Afin de calculer la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{J}}^2$ dans les fragments à partir de l'état (de type BCS) du système global, nous avons été amenés à définir une telle quantité compte tenu de la non localité de cet opérateur.

Du point de vue physique, pour un noyau pair-pair donné subissant une fission spontanée, nous avons obtenu des courbes d'énergie de configuration en fonction de la masse du fragment lourd A_{lourd} (à élongation globale fixée) présentant un minimum pour une masse voisine du maximum de la distribution de masse expérimentale correspondante. La fragmentation associée à cette solution a été interprétée comme la plus probable, en assez bon

accord avec les données expérimentales. Choissant une fragmentation voisine, nous avons ensuite appliqué le modèle de génération de moment angulaire par pompage orientationnel et avons retrouvé l'allure de la courbe de variation du spin des fragments en fonction du nombre total de neutrons émis ν_{tot} conformément aux résultats d'expériences récentes, tout au moins pour la partie croissante correspondant aux faibles énergies d'excitation.

Ce travail semble offrir des perspectives intéressantes, appelant certaines améliorations ou extensions. Concernant les barrières de fission, nous pourrions d'une part restaurer la symétrie de parité en effectuant une projection exacte après variation, d'autre part tenir compte du mouvement vibrationnel de point-zéro en incluant les corrélations associées (dans le formalisme HTDA par exemple). Il serait d'ailleurs intéressant de réaliser ces études dans le cadre de l'approximation HTDA afin de résoudre le problème du nombre de particules total non conservé dans l'approche BCS.

En ce qui concerne les fragments, nous pourrions calculer leurs distributions de masse à partir de l'énergie potentielle fonction de A_{lourd} . La dynamique opérant juste avant la scission constitue un champ d'étude encore à explorer et il nous apparaît notamment très intéressant de chercher à calculer l'énergie cinétique de pré-scission. Cela contribuerait à affiner nos hypothèses sur l'énergie d'excitation des fragments sur lesquelles repose en partie notre étude du spin des fragments. Enfin, il conviendrait d'améliorer la description du moment angulaire de ces derniers en incorporant des sources de moment volontairement écartées ici, comme le mouvement orbital relatif et le spin initial, mais aussi en effectuant la projection à la Peierls et Yoccoz afin de déterminer de façon totalement microscopique la distribution de spin dans les fragments. Cette distribution s'avère nécessaire dans beaucoup d'applications, notamment dans les calculs de sections efficaces d'émission de neutrons de fission. Elle est actuellement très mal connue et nous espérons que notre présente étude ainsi que ce qui pourrait la compléter puisse fournir des informations précieuses à ce sujet.

Annexes

ANNEXE A

La distribution δ de Dirac

A.1 Définitions et notations

A.1 a Cas à une dimension

Soit $\mathcal{F}(\mathbb{R})$ l'ensemble des fonctions f bornées et continues par morceaux \mathbb{R} vers \mathbb{R} . De telles fonctions sont régularisables car en chaque point de leur ensemble de définition, elles admettent une limite finie à droite et à gauche, la régularisée \tilde{f} de f s'écrivant :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \tilde{f}(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2} (f(x - \epsilon) + f(x + \epsilon)) . \quad (\text{A-1})$$

On définit la distribution δ de Dirac sur l'ensemble $\mathcal{F}(\mathbb{R})$ par son action sur une fonction quelconque f de cet ensemble, notée $\langle \delta | f \rangle$:

$$\begin{aligned} \delta : \mathcal{F}(\mathbb{R}) &\rightarrow \mathbb{R} \\ f &\rightarrow \langle \delta | f \rangle \equiv \tilde{f}(0) . \end{aligned} \quad (\text{A-2})$$

Soit d_ϵ la fonction réelle continue par morceaux définie par :

$$d_\epsilon(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| > \epsilon \\ \frac{1}{2\epsilon} & \text{si } |x| < \epsilon \end{cases} \quad (\epsilon > 0) . \quad (\text{A-3})$$

Son intégrale sur \mathbb{R} vaut 1 quel que soit ϵ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} d_\epsilon(x) dx = \frac{1}{2\epsilon} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx = 1 . \quad (\text{A-4})$$

Si l'on considère une fonction $f \in \mathcal{F}(\mathbb{R})$, alors l'intégrale de son produit par d_ϵ sur \mathbb{R} converge lorsque ϵ tend vers 0 :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{\infty} d_\epsilon(x) f(x) dx \right) = \tilde{f}(0) . \quad (\text{A-5})$$

Par conséquent, on identifie la distribution δ définie par (A-2) avec la limite de la suite de fonctions $n d_{\frac{1}{2}}(nx)$ et on note de la façon suivante l'action de δ sur une fonction continue par morceaux sur \mathbb{R} :

$$\forall f \in \mathcal{F}(\mathbb{R}), \langle \delta | f \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = \tilde{f}(0) . \quad (\text{A-6})$$

La distribution de Dirac est la dérivée de la distribution de Heaviside, définie par :

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ \frac{1}{2} & \text{si } x = 0 \\ 1 & \text{si } x > 0 \end{cases} . \quad (\text{A-7})$$

A.1 b Généralisation à 3 dimensions

Il est possible d'étendre les définitions précédentes à \mathbb{R}^3 en considérant l'ensemble $\mathcal{F}(\mathbb{R}^3)$ des fonctions f bornées, continues par morceaux sur \mathbb{R}^3 et dont les points de discontinuité constituent une réunion dénombrable de surfaces continues \mathcal{S}_i . La régularisée \tilde{f} d'une fonction $f \in \mathcal{F}(\mathbb{R}^3)$ en un point de \mathcal{S}_i séparant deux régions \mathcal{V}_1 et \mathcal{V}_2 dans lesquelles f est continue s'écrit alors, en coordonnées cartésiennes :

$$\tilde{f}(\mathbf{r}) = \lim_{\substack{\boldsymbol{\epsilon} \rightarrow \mathbf{0} \\ \mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon} \in \mathcal{V}_1 \\ \mathbf{r} - \boldsymbol{\epsilon} \in \mathcal{V}_2}} \frac{1}{2} (f(\mathbf{r} - \boldsymbol{\epsilon}) + f(\mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon})) , \quad (\text{A-8})$$

tandis qu'en un point \mathbf{r}_0 où f est continue, on a simplement $\tilde{f}(\mathbf{r}_0) = f(\mathbf{r}_0)$.

La distribution δ à 3 dimensions est en fait le produit direct des distributions δ à une dimension pour chaque coordonnée cartésienne :

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x) \delta(y) \delta(z) . \quad (\text{A-9})$$

Son action dans $\mathcal{F}(\mathbb{R})$ s'écrit :

$$\forall f \in \mathcal{F}(\mathbb{R}^3), \langle \delta | f \rangle \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} \delta(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) = \tilde{f}(\mathbf{0}) . \quad (\text{A-10})$$

A.2 Propriétés

A.2 a Cas à une dimension

Soit $f \in \mathcal{F}(\mathbb{R})$.

Intégration sur \mathbb{R}

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) \delta(x - x_0) dx = \tilde{f}(x_0) . \quad (\text{A-1})$$

Intégration sur intervalle fini $[a; b]$ de \mathbb{R}

$$\int_a^b f(x) \delta(x - x_0) dx = \Pi_{[a; b]}(x_0) \tilde{f}(x_0) = \begin{cases} \tilde{f}(x_0) & \text{si } x_0 \in]a; b[\\ \frac{1}{2} f(a^+) & \text{si } x_0 = a \\ \frac{1}{2} f(b^-) & \text{si } x_0 = b \\ 0 & \text{si } x_0 \notin [a; b] \end{cases} \quad (\text{A-2})$$

où $\Pi_{[a;b]}(x)$ est la fonction «porte sur $[a;b]$ » définie par :

$$\Pi_{[a;b]}(x) = \Theta\left(\frac{x-a}{2(b-a)}\right) - \Theta\left(\frac{x-b}{2(b-a)}\right) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in]a;b[\\ \frac{1}{2} & \text{si } x = a \text{ ou } x = b \\ 0 & \text{si } x \notin [a;b] \end{cases} . \quad (\text{A-3})$$

Double intégration

$$\int_{a'}^{b'} dx' \int_a^b dx f(x, x') \delta(x - x') = \int_{[a;b] \cap [a';b']} dx f(x, x) . \quad (\text{A-4})$$

Si l'intersection de $[a;b]$ et de $[a';b']$ est un ensemble de mesure nulle, alors l'intégrale s'annule. C'est le cas lorsque l'intersection est vide ou lorsqu'elle est égale à un singleton (nécessairement $\{a\}$ ou $\{b\}$, car $a' < b'$ et $a < b$ par hypothèse).

Dérivation

Si f est dérivable sur $[a;b]$, alors :

$$\int_a^b f(x) \delta'(x - x_0) dx = -f'(x_0) \Pi_{[a;b]}(x_0) + f(x_0) \left(\delta(x_0 - b) - \delta(x_0 - a) \right) , \quad (\text{A-5})$$

$$\int_{a'}^{b'} dx' \int_a^b dx f(x, x') \delta'(x - x') = f(b, b) \Pi_{[a';b']}(b) - f(a, a) \Pi_{[a';b']}(a) - \int_{[a;b] \cap [a';b']} dx \frac{\partial f}{\partial x_1}(x, x) . \quad (\text{A-6})$$

A.2 b Cas à 3 dimensions

Soient $f \in \mathcal{F}(\mathbb{R}^3)$ et $g \in \mathcal{F}(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$ de classe \mathcal{C}^1 par morceaux sur $\mathcal{V} \times \mathcal{V}'$.

Intégration sur tout l'espace \mathbb{R}^3

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \tilde{f}(\mathbf{r}_0) . \quad (\text{A-7})$$

Intégration sur un volume fini et double intégration

$$\int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \Pi_{\mathcal{V}}(\mathbf{r}_0) \tilde{f}(\mathbf{r}_0) = \begin{cases} \tilde{f}(\mathbf{r}_0) & \text{si } \mathbf{r}_0 \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S} \\ \frac{1}{2} f(\mathbf{r}_0^{\text{int}}) & \text{si } \mathbf{r}_0 \in \mathcal{S} \\ 0 & \text{si } \mathbf{r}_0 \notin \mathcal{V} \end{cases} \quad (\text{A-8})$$

où $\mathcal{V} \setminus \mathcal{S}$ est une notation signifiant le volume \mathcal{V} privé de sa surface \mathcal{S} et où $f(\mathbf{r}_0^{\text{int}})$ désigne la limite de f en \mathbf{r}_0 suivant $\mathcal{V} \setminus \mathcal{S}$. Lorsque l'on intègre sur \mathbf{r}_0 , on obtient donc :

$$\int_{\mathcal{V}'} d^3\mathbf{r}' \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} f(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_{\mathcal{V} \cap \mathcal{V}'} d^3\mathbf{r} f(\mathbf{r}, \mathbf{r}) . \quad (\text{A-9})$$

Gradient

$$\int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = -\Pi_{\mathcal{V}}(\mathbf{r}_0) \widetilde{\nabla_1 g}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) + g(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) \delta_{\mathcal{S}}(\mathbf{r}_0) \mathbf{n}_{ex} . \quad (\text{A-10})$$

En intégrant sur \mathbf{r}_0 , on trouve :

$$\int_{\mathcal{V}'} d^3\mathbf{r}' \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = - \int_{\mathcal{V} \cap \mathcal{V}'} d^3\mathbf{r} \nabla_1 g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) + \int_{\mathcal{S} \cap (\mathcal{V}' \setminus \mathcal{S}')} d^2 S g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \mathbf{n}_{ex} + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{S} \cap \mathcal{S}'} d^2 S g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \mathbf{n}_{ex} . \quad (\text{A-11})$$

Divergence

$$\int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \cdot \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = -\Pi_{\mathcal{V}}(\mathbf{r}_0) \widetilde{\nabla_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)} + \delta_{\mathcal{S}}(\mathbf{r}_0) \mathbf{A}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{n}_{ex} \quad (\text{A-12})$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}'} d^3\mathbf{r}' \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= - \int_{\mathcal{V} \cap \mathcal{V}'} d^3\mathbf{r} \nabla_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) + \int_{\mathcal{S} \cap (\mathcal{V}' \setminus \mathcal{S}')} d^2 S \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_{ex} \\ &+ \frac{1}{2} \int_{\mathcal{S} \cap \mathcal{S}'} d^2 S \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_{ex} . \end{aligned} \quad (\text{A-13})$$

Rotationnel

$$\int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \wedge \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = -\Pi_{\mathcal{V}}(\mathbf{r}_0) \widetilde{\nabla_1 \wedge \mathbf{A}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)} + \delta_{\mathcal{S}}(\mathbf{r}_0) \mathbf{A}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) \wedge \mathbf{n}_{ex} \quad (\text{A-14})$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}'} d^3\mathbf{r}' \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \wedge \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \int_{\mathcal{V} \cap \mathcal{V}'} d^3\mathbf{r} \nabla_1 \wedge \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) + \int_{\mathcal{S} \cap (\mathcal{V}' \setminus \mathcal{S}')} d^2 S \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \wedge \mathbf{n}_{ex} \\ &+ \frac{1}{2} \int_{\mathcal{S} \cap \mathcal{S}'} d^2 S \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \wedge \mathbf{n}_{ex} . \end{aligned} \quad (\text{A-15})$$

Laplacien

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}'} d^3\mathbf{r}' \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \int_{\mathcal{V} \cap \mathcal{V}'} d^3\mathbf{r} \nabla_1^2 g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) - \int_{\mathcal{S}} d^2 S \mathbf{n}_{ex} \cdot \int_{\mathcal{S}'} d^2 S' \mathbf{n}'_{ex} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &+ \int_{\mathcal{S} \cap (\mathcal{V}' \setminus \mathcal{S}')} d^2 S \nabla_2 g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_{ex} + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{S} \cap \mathcal{S}'} d^2 S \nabla_2 g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_{ex} \end{aligned} \quad (\text{A-16})$$

Le deuxième terme de (A-16), noté $-S$, contient une distribution, la distribution surfacique de Dirac $\delta_{\mathcal{S}}$:

$$\delta_{\mathcal{S}}(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{S}} d^2 S' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{A-17})$$

dont l'action sur une fonction f de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^3)$ s'écrit :

$$\langle \delta_{\mathcal{S}} | f \rangle = \int_{\mathcal{S}} d^2 S f(\mathbf{r}) . \quad (\text{A-18})$$

Par conséquent, le terme en S dans (A-16) prend la forme suivante :

$$S = \int_{\mathcal{S} \cap \mathcal{S}'} d^2 S \mathbf{n}_{ex} \cdot \mathbf{n}'_{ex} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \delta_{\mathcal{S}}(\mathbf{r}) \quad (\text{A-19})$$

où $\delta_{\mathcal{S}}(\mathbf{r}) = +\infty$ si $\mathbf{r} \in \mathcal{S}$. Si l'une des deux conditions suivantes au moins est vérifiée :

$$\begin{aligned} \text{mes}_{\mathbb{R}^2}(\mathcal{S} \cap \mathcal{S}') &= 0 \\ \forall \mathbf{r} \in \mathcal{S} \cap \mathcal{S}', \quad g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) &= 0 , \end{aligned}$$

alors $S = 0$; si au contraire $\text{mes}_{\mathbb{R}^2}(\mathcal{S} \cap \mathcal{S}') \neq 0$, alors l'intégrale S est divergente. L'action du laplacien de δ donnée par (A-16) s'écrit finalement :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}'} d^3\mathbf{r}' \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \int_{\mathcal{V} \cap \mathcal{V}'} d^3\mathbf{r} \nabla_1^2 g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) - \int_{\mathcal{S} \cap \mathcal{S}'} d^2 S \mathbf{n}_{\mathbf{ex}} \cdot \mathbf{n}'_{\mathbf{ex}} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \delta_{\mathcal{S}}(\mathbf{r}) \\ &+ \int_{\mathcal{S} \cap (\mathcal{V}' \setminus \mathcal{S}')} d^2 S \nabla_2 g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_{ex} + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{S} \cap \mathcal{S}'} d^2 S \nabla_2 g(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}_{ex} . \end{aligned} \quad (\text{A-20})$$

ANNEXE B

Polynômes d'Hermite et de Laguerre associés

La décomposition de la fonction d'onde $\varphi_i^{(\sigma)}(\mathbf{r})$ (à symétrie axiale) sur la base des fonctions propres de l'oscillateur harmonique axial permet de séparer les variables r et z dans $\psi_i^{(\sigma)}(r, z)$:

$$\varphi_i^{(\sigma)}(\mathbf{r}) = \sum_{n_z, n_r, \Lambda} C_{n_z n_r \Lambda \Sigma}^{(i)} \Psi_{n_z}(z) \Psi_{n_r}^{\Lambda}(r) \frac{e^{i\Lambda\theta}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{B-1})$$

ce qui donne, compte tenu de la symétrie de la fonction d'onde $\varphi_i^{(\sigma)}(\mathbf{r})$:

$$\psi_i^{(\sigma)}(r, z) = \sum_{n_z, n_r} C_{n_z n_r \Lambda \Sigma}^{(i)} \Psi_{n_z}(z) \Psi_{n_r}^{\Lambda}(r) \quad (\Lambda \text{ fixé par } \Lambda = \Omega_i - \Sigma) \quad (\text{B-2})$$

avec les fonctions d'onde d'oscillateur harmonique axiale $\Psi_{n_z}(z)$ et radiale $\Psi_{n_r}^{\Lambda}(r)$:

$$\Psi_{n_z}(z) = \sqrt{\beta_z} N_{n_z} H_{n_z}(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (\text{B-3})$$

$$\Psi_{n_r}^{\Lambda}(r) = \sqrt{2} \beta_{\perp} N_{n_r}^{\Lambda} L_{n_r}^{\Lambda}(\eta) \eta^{\frac{\Lambda}{2}} e^{-\frac{\eta}{2}}. \quad (\text{B-4})$$

Les deux variables $\xi = \beta_z z$ et $\eta = \beta_{\perp}^2 r^2$ sont sans dimension et N_{n_z} et $N_{n_r}^{\Lambda}$ sont deux constantes de normalisation valant :

$$N_{n_z} = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^{n_z} n_z!}} \quad (\text{B-5})$$

$$N_{n_r}^{\Lambda} = \sqrt{\frac{n_r!}{(n_r + \Lambda)!}}. \quad (\text{B-6})$$

Les fonctions $H_n(\xi)$ et $L_n^\Lambda(\eta)$ sont les polynômes d'Hermite et de Laguerre généralisé respectivement et s'expriment explicitement selon :

$$H_n(\xi) = n! \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{(-1)^k}{k! (n-2k)!} (2\xi)^{n-2k} \quad (\text{B-7})$$

$$L_n^{(\Lambda)}(\eta) = (n+\Lambda)! \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k}{k! (n-k)! (\Lambda+k)!} \eta^k. \quad (\text{B-8})$$

Par conséquent, les fonctions $\Psi_{n_z}(z)$ et $\Psi_{n_r}^\Lambda(r)$ sont réelles. Elles vérifient les relations d'orthogonalité suivantes :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \Psi_{n_z}(z) \Psi_{n'_z}(z) = \delta_{n_z n'_z} \quad (\text{B-9})$$

$$\int_0^{\infty} dr r \Psi_{n_r}^\Lambda(r) \Psi_{n'_r}^\Lambda(r) = \delta_{n_r n'_r}. \quad (\text{B-10})$$

De plus, les polynômes d'Hermite $H_n(\xi)$ satisfont à l'équation différentielle, la relation de récurrence et la relation différentielle suivantes :

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2}(\xi) - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi}(\xi) + 2n H_n(\xi) = 0 \quad (\text{B-11})$$

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi) \quad (\text{B-12})$$

$$\frac{dH_n}{d\xi}(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi). \quad (\text{B-13})$$

En appliquant à l'expression (B-3) de $\Psi_{n_z}(z)$ la formule de Leibnitz relative à la dérivée d'ordre m d'un produit de deux fonctions, combinée à la propriété suivante des polynômes d'Hermite :

$$\frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) = (-1)^n H_n(\xi) e^{-\xi^2} \quad (\text{B-14})$$

ainsi qu'à la relation (B-13) réitérée, on obtient la dérivée d'ordre m de $\Psi_{n_z}(z)$ sous la forme :

$$\frac{d^m \Psi_{n_z}}{dz^m} = \left(-\frac{\beta_z}{\sqrt{2}} \right)^m \sum_{k=0}^M C_m^k (-2)^k \sqrt{\frac{n_z!}{(n_z-k)!}} H_{m-k} \left(\frac{\xi}{\sqrt{2}} \right) \Psi_{n_z-k}(z), \quad (\text{B-15})$$

où $M = \min(m, n_z)$. On en déduit les expressions suivantes dans les cas particuliers où $m = 1$ et $m = 2$ respectivement :

$$\frac{d\Psi_{n_z}}{dz}(z) = \beta_z \left(\sqrt{2n_z} \Psi_{n_z-1}(z) - \beta_z z \Psi_{n_z}(z) \right) \quad (\text{B-16})$$

$$\frac{d^2 \Psi_{n_z}}{dz^2}(z) = \beta_z^2 \left(2 \sqrt{n_z(n_z-1)} \Psi_{n_z-2}(z) - 2 \sqrt{2n_z} \beta_z z \Psi_{n_z-1}(z) + (\beta_z^2 z^2 - 1) \Psi_{n_z}(z) \right). \quad (\text{B-17})$$

Pour les polynômes de Laguerre généralisés $L_n^{(\Lambda)}(\eta)$, on a :

$$\eta \frac{d^2 L_n^\Lambda}{d\eta^2}(\eta) + (\Lambda + 1 - \eta) \frac{dL_n^\Lambda}{d\eta}(\eta) + n L_n^\Lambda(\eta) = 0 \quad (\text{B-18})$$

$$(n + 1) L_{n+1}^\Lambda(\eta) = (2n + \Lambda + 1 - \eta) L_n^\Lambda(\eta) - (n + \Lambda) L_{n-1}^\Lambda(\eta) \quad (\text{B-19})$$

$$\eta \frac{dL_n^\Lambda}{d\eta}(\eta) = n L_n^\Lambda(\eta) - (n + \Lambda) L_{n-1}^\Lambda(\eta), \quad (\text{B-20})$$

donc les dérivées première et seconde des fonctions d'onde $\Psi_{n_r}^\Lambda(r)$ vérifient :

$$\frac{d\Psi_{n_r}^\Lambda}{dr}(r) = \frac{1}{r} \left[(2n_r + \Lambda - \beta_\perp^2 r^2) \Psi_{n_r}^\Lambda(r) - 2 \sqrt{n_r(n_r + \Lambda)} \Psi_{n_r-1}^\Lambda(r) \right] \quad (\text{B-21})$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \Psi_{n_r}^\Lambda}{dr^2}(r) = \frac{1}{r^2} & \left[4 \sqrt{n_r(n_r - 1)(n_r + \Lambda)(n_r + \Lambda - 1)} \Psi_{n_r-2}^\Lambda(r) \right. \\ & + 2 \sqrt{n_r(n_r + \Lambda)} \left(3 - 2(2n_r + \Lambda - \beta_\perp^2 r^2) \right) \Psi_{n_r-1}^\Lambda(r) \\ & \left. + \left((2n_r + \Lambda - \beta_\perp^2 r^2)^2 - (2n_r + \Lambda + \beta_\perp^2 r^2) \right) \Psi_{n_r}^\Lambda(r) \right]. \quad (\text{B-22}) \end{aligned}$$

ANNEXE C

Moments multipôlares d'un noyau fissionnant à symétrie axiale

On considère une densité de masse (nombre de nucléons par unité de volume) $\rho(M)$ à symétrie cylindrique, c'est-à-dire ne dépendant que de la coordonnée le long de l'axe de fission z et de la coordonnée radiale r : $\rho(M) = f_\rho(\mathbf{r}) = f_\rho(z, r)$. La fonction f_ρ représente la densité ρ dans un repère donné.

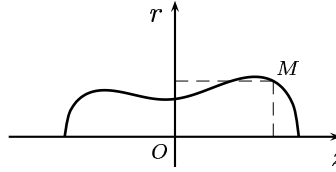


Figure C.1 — Coupe longitudinale de la surface à bord abrupt d'un noyau à symétrie cylindrique.

La figure C.1 définit le repère utilisé et représente dans l'approximation de densité à bord abrupt un noyau symétrique de révolution autour de l'axe (Oz).

De manière générale les moments de cette distribution sont des quantités définies par :

$$W \equiv \int d^3\mathbf{r} w(\mathbf{r}) f_\rho(\mathbf{r}) , \quad (\text{C-1})$$

où $w(\mathbf{r})$ est une fonction de poids. Compte tenu de la symétrie axiale, on a :

$$W = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr r w(z, r) f_\rho(z, r) . \quad (\text{C-2})$$

En posant

$$\zeta = z \beta_z \quad \text{et} \quad \eta = r^2 \beta_\perp^2 , \quad (\text{C-3})$$

il vient alors, en gardant les mêmes notations pour les fonctions w et f_ρ :

$$W = \frac{\pi}{\beta_z \beta_\perp^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta w(\zeta, \eta) f_\rho(\zeta, \eta) . \quad (\text{C-4})$$

Remarque :

Une translation du noyau d'une quantité a/β_z par rapport au repère précédent et suivant l'axe de symétrie entraîne une valeur différente de W :

$$W_a = \frac{\pi}{\beta_z \beta_\perp^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta w(\zeta, \eta) f_\rho(\zeta - a, \eta) \quad (\text{C-5})$$

car la densité en un point du noyau est indépendante du repère :

$$\rho(M) = f_\rho(\zeta, \eta) = f_\rho^{(a)}(\zeta - a, \eta) \quad (\text{C-6})$$

où $f_\rho^{(a)}$ est la fonction représentant la densité dans le repère translaté. Autrement dit, étant donné une distribution de densité de nucléons dans l'espace, les moments associés vont dépendre du repère choisi pour exprimer la fonction f_ρ , donc de la position du centre de masse par rapport à l'origine de ce repère. Par conséquent, une distribution admettant un plan de symétrie perpendiculaire à (Oz) peut avoir un moment impair en z non nul.

Dans la suite on s'intéresse à un noyau subissant un processus de fission binaire tout au long duquel on suppose la symétrie axiale préservée. Dans une première partie on détermine l'expression des moments multipôlares et le centre de masse du système fissionnant. Dans une deuxième partie, on établit les expressions de ces quantités pour les deux fragments (chacun conservant la symétrie axiale).

C.1 Moments relatifs au noyau fissionnant

Leur calcul s'appuie sur les notations de la figure C.1.

C.1 a Moments multipôlares de masse $Q_{\ell m}$ du noyau

Par définition, $Q_{\ell m}$ est le moment de la distribution de masse associé à la fonction de poids $w(\mathbf{r}) = r^\ell Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ exprimée en coordonnées sphériques :

$$Q_{\ell m} \equiv \int d^3\mathbf{r} r^\ell Y_\ell^m(\theta, \varphi) f_\rho(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dr r^{\ell+2} \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi Y_\ell^m(\theta, \varphi) f_\rho(r, \theta, \varphi) , \quad (\text{C-7})$$

où $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ est l'harmonique sphérique d'ordre (ℓ, m) , dont l'expression fait intervenir le polynôme de Legendre associé P_ℓ^m :

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = e^{-im\varphi} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) .$$

Compte tenu de la symétrie axiale supposée ici, l'intégrand ne dépend de φ que par l'exponentielle complexe $e^{-im\varphi}$ et l'intégration sur φ se réduit à :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{-im\varphi} = \delta_{m0} .$$

Le moment multipolaire $Q_{\ell m}$ peut donc s'écrire, après le changement de variable (C-3) et en posant $q = \left(\frac{\beta_{\perp}}{\beta_z}\right)^2$:

$$Q_{\ell m} = \delta_{m0} Q_{\ell 0} \quad (\text{C-8})$$

avec

$$Q_{\ell 0} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \frac{\pi}{\beta_z \beta_{\perp}^2} \frac{1}{\beta_{\perp}^{\ell}} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta (q\zeta^2 + \eta)^{\frac{\ell}{2}} P_{\ell} \left(\frac{\sqrt{q}\zeta}{\sqrt{q\zeta^2 + \eta}} \right) f_{\rho}(\zeta, \eta) . \quad (\text{C-9})$$

C.1 b Cas particuliers : moments quadrupolaire, octupolaire et hexadécapolaire

Les polynômes de Legendre de degré 2, 3 et 4 ont pour expressions respectives :

$$\begin{aligned} P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1) , \\ P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) , \\ P_4(x) &= \frac{1}{8} \left(35x^4 - \frac{15}{2}x^2 + 3 \right) . \end{aligned} \quad (\text{C-10})$$

Pour des raisons historiques, on omet traditionnellement le coefficient en $1/\sqrt{\pi}$ et le $1/2$ du polynôme de Legendre pour Q_{20} . On en déduit les moments quadrupolaire ($\ell = 2$), octupolaire ($\ell = 3$) et hexadécapolaire ($\ell = 4$) du noyau fissionnant :

$$Q_{20} = \frac{\pi}{\beta_z \beta_{\perp}^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta (2q\zeta^2 - \eta) f_{\rho}(\zeta, \eta) , \quad (\text{C-11})$$

$$Q_{30} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \frac{\pi}{\beta_z \beta_{\perp}^5} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta \sqrt{q}\zeta \left(q\zeta^2 - \frac{3}{2}\eta \right) f_{\rho}(\zeta, \eta) , \quad (\text{C-12})$$

$$Q_{40} = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \frac{\pi}{\beta_z \beta_{\perp}^6} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta \left(q^2\zeta^4 - 3q\zeta^2\eta + \frac{3}{8}\eta^2 \right) f_{\rho}(\zeta, \eta) . \quad (\text{C-13})$$

C.1 c Centre de masse du noyau

Par symétrie axiale, le centre de masse du noyau se situe sur son axe de symétrie (Oz) au point d'abscisse $\langle z \rangle$ définie par :

$$\langle z \rangle \equiv \frac{\int d^3\mathbf{r} w(\mathbf{r}) f_{\rho}(\mathbf{r})}{\int d^3\mathbf{r} f_{\rho}(\mathbf{r})} , \quad (\text{C-14})$$

c'est-à-dire :

$$\langle z \rangle = \frac{1}{A} \frac{\pi}{\beta_z^2 \beta_\perp^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta \zeta f_\rho(\zeta, \eta) \quad (\text{C-15})$$

où $A = \int d^3\mathbf{r} f_\rho(\mathbf{r})$ est le nombre total de nucléons du noyau. On remarque immédiatement que si la densité admet un plan de symétrie perpendiculaire à l'axe (Oz) d'abscisse a , alors $f_\rho(\zeta, \eta) = f_\rho(2a - \zeta, \eta)$ et il en découle que $\langle z \rangle = a$. Suite à la remarque ci-dessus, la valeur de Q_{30} correspondante est a priori non nulle :

$$Q_{30} = a \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \frac{\pi}{\beta_z \beta_\perp^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta \left[\left(q \zeta^2 - \frac{3}{2} \eta \right) f_\rho(\zeta, \eta) + 2 q \zeta^2 f_\rho(\zeta + a \beta_z, \eta) \right] \quad (\text{C-16})$$

sauf si $a = 0$. On appelle *repère naturel* du noyau le repère dont l'origine est confondue avec le centre de masse et dont l'axe (Oz) coïncide avec l'axe de symétrie. Dans ce repère, la fonction $f_\rho(z, r)$ est notée plus brièvement $\rho(z, r)$.

C.2 Moments relatifs aux fragments de fission

C.2 a Définition des fragments : densité et centres de masse

Pour calculer les moments relatifs aux fragments, on a besoin de définir un plan de séparation des fragments, d'équation $z = z_M$. On choisit pour cela de définir le point M de l'axe de symétrie (Oz) ayant pour coordonnée $z = z_M$ comme le point situé à égale distance des bords en vis-à-vis de chaque fragment, où la position des bords correspond par convention à la mi-hauteur de la densité nucléaire de chacun des fragments. Ensuite on construit les fonctions adoucies représentant les densités de ces derniers :

$$\begin{aligned} f_1(z, r) &= F_\delta(z - z_M) \rho(z, r) \\ f_2(z, r) &= G_\delta(z - z_M) \rho(z, r) \end{aligned} \quad (\text{C-17})$$

où les fonctions de projection adoucies $F_\delta(z)$ et $G_\delta(z)$ sur les fragments gauche et droit respectivement prennent la forme de fonctions de Fermi de diffusivité δ :

$$F_\delta(z) = \frac{1}{1 + e^{\frac{z}{\delta}}} G_\delta(z) = 1 - F_\delta(z) = \frac{1}{1 + e^{\frac{-z}{\delta}}} = F_\delta(-z) . \quad (\text{C-18})$$

On peut donc décomposer $\rho(z, r)$ selon :

$$\rho(z, r) = f_1(z, r) + f_2(z, r) . \quad (\text{C-19})$$

Afin de travailler dans les repères naturels de chaque fragment i , on introduit leurs densités « naturelles » :

$$\rho_i(z_i, r) \equiv f_i(z, r) \quad \text{avec} \quad z_i \equiv z - z_{C_i} . \quad (\text{C-20})$$

Les moments associés à la fonction de poids w sont alors définis par :

$$W_i \equiv \int d^3\mathbf{r} w(\mathbf{r}) \rho_i(\mathbf{r}) , \quad (\text{C-21})$$

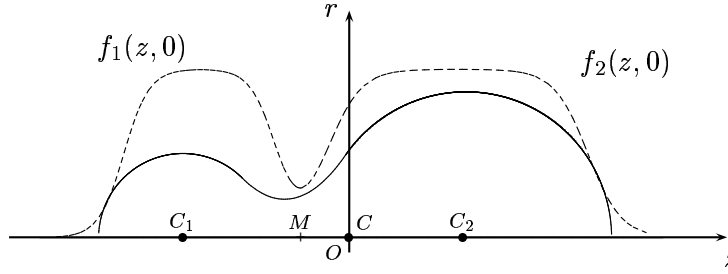


Figure C.2 — Coupes longitudinales de la densité et de la surface à bord abrupt des fragments primaires d'un noyau fissionnant. Le système de coordonnées utilisé est celui du repère naturel.

c'est-à-dire, compte tenu de la symétrie axiale et de la définition (C-17) :

$$W_1 = \frac{\pi}{\beta_z \beta_\perp^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta F_{\delta/\beta_z}(\zeta - \zeta_M) w(\zeta - \zeta_{C_1}, \eta) \rho(\zeta, \eta) \quad (\text{C-22})$$

$$W_2 = \frac{\pi}{\beta_z \beta_\perp^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta G_{\delta/\beta_z}(\zeta_M - \zeta) w(\zeta - \zeta_{C_2}, \eta) \rho(\zeta, \eta), \quad (\text{C-23})$$

avec la notation $\zeta_M = z_M/\beta_z$. Les centres de masse des fragments ont pour coordonnées sur l'axe de symétrie :

$$\begin{aligned} z_{C_1} &= \frac{2\pi}{A_1} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr r F_\delta(z - z_M) z \rho(z, r) = \frac{1}{A_1} \frac{\pi}{\beta_z^2 \beta_\perp^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta F_{\delta/\beta_z}(\zeta - \zeta_M) \zeta \rho(\zeta, \eta) \\ z_{C_2} &= \frac{2\pi}{A_2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dr r G_\delta(z_M - z) z \rho(z, r) = \frac{1}{A_2} \frac{\pi}{\beta_z^2 \beta_\perp^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta G_{\delta/\beta_z}(\zeta_M - \zeta) \zeta \rho(\zeta, \eta), \end{aligned} \quad (\text{C-24})$$

où A_i est le nombre de nucléons dans le fragment i , calculé comme :

$$A_i = \int d^3\mathbf{r} \rho_i(\mathbf{r}). \quad (\text{C-25})$$

C.2 b Moments multipôlares de masse $Q_{\ell m}^{(i)}$ des fragments

D'après (C-9), le moment multipolaire d'ordre (ℓ, m) du fragment i a pour expression :

$$Q_{\ell m}^{(i)} = \delta_{m0} Q_{\ell 0}^{(i)} \quad (\text{C-26})$$

avec

$$Q_{\ell 0}^{(i)} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \frac{\pi}{\beta_z \beta_{\perp}^2} \frac{1}{\beta_{\perp}^{\ell}} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta F_{\delta/\beta_z}(\epsilon_i(\zeta - \zeta_M)) (q(\zeta - \zeta_{C_i})^2 + \eta)^{\frac{\ell}{2}} P_{\ell}\left(\frac{\sqrt{q}(\zeta - \zeta_{C_i})}{\sqrt{q(\zeta - \zeta_{C_i})^2 + \eta}}\right) \rho(\zeta, \eta), \quad (\text{C-27})$$

où $\epsilon_1 = 1$ et $\epsilon_2 = -1$. Les expressions (C-11), (C-12) et (C-13) des moments quadrupolaire, octupolaire et hexadécapolaire deviennent, pour chaque fragment :

$$Q_{20}^{(i)} = \frac{\pi}{\beta_z \beta_{\perp}^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta F_{\delta/\beta_z}(\epsilon_i(\zeta - \zeta_M)) (2q(\zeta - \zeta_{C_i})^2 - \eta) \rho(\zeta, \eta), \quad (\text{C-28})$$

$$Q_{30}^{(i)} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \frac{\pi}{\beta_z \beta_{\perp}^5} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta F_{\delta/\beta_z}(\epsilon_i(\zeta - \zeta_M)) \sqrt{q}(\zeta - \zeta_{C_i}) \left(q(\zeta - \zeta_{C_i})^2 - \frac{3}{2}\eta\right) \rho(\zeta, \eta), \quad (\text{C-29})$$

$$Q_{40}^{(i)} = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \frac{\pi}{\beta_z \beta_{\perp}^6} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \int_0^{\infty} d\eta F_{\delta/\beta_z}(\epsilon_i(\zeta - \zeta_M)) \left(q^2(\zeta - \zeta_{C_i})^4 - 3q(\zeta - \zeta_{C_i})^2\eta + \frac{3}{8}\eta^2\right) \rho(\zeta, \eta). \quad (\text{C-30})$$

C.3 Relation entre les moments quadrupolaires des fragments et du système total

Le moment quadrupolaire total (C-11) peut se décomposer selon :

$$\begin{aligned} Q_{20} &= \int d^3\mathbf{r} (3z^2 - \mathbf{r}^2) \rho(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3\mathbf{r} F_{\delta}(z) [2(z - z_{C_1})^2 + 4z_{C_1}(z - z_{C_1}) + 2z_{C_1}^2 - (x^2 + y^2)] \rho(\mathbf{r}) \\ &\quad + \int d^3\mathbf{r} G_{\delta}(z) [2(z - z_{C_2})^2 + 4z_{C_2}(z - z_{C_2}) + 2z_{C_2}^2 - (x^2 + y^2)] \rho(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{C-31})$$

ce qui, après un regroupement approprié des différents termes et utilisation des expressions (C-25) et (C-28), conduit à la forme suivante de Q_{20} :

$$Q_{20} = \sum_{i=1}^2 \left(Q_{20}^{(i)} + 2 A_i z_{C_i}^2 \right). \quad (\text{C-32})$$

Par ailleurs, la condition imposant au centre de masse du système total de coïncider avec l'origine du repère se traduit par :

$$\langle z \rangle = 0. \quad (\text{C-33})$$

Or on a :

$$A \langle z \rangle = \sum_{i=1}^2 A_i z_{C_i}, \quad (\text{C-34})$$

donc :

$$A_1 z_{C_1} + A_2 z_{C_2} = 0 . \quad (\text{C-35})$$

En appelant D la distance entre les centres de masse, d'expression :

$$\begin{aligned} D &= |z_{C_1} - z_{C_2}| \\ &= z_{C_2} - z_{C_1} \quad \text{selon la convention adoptée ici ,} \end{aligned} \quad (\text{C-36})$$

et compte tenu du fait que $A_1 + A_2 = A$, on peut écrire z_{C_1} et z_{C_2} sous la forme :

$$z_{C_1} = -\frac{A_2}{A} D \quad z_{C_2} = \frac{A_1}{A} D . \quad (\text{C-37})$$

Ainsi Q_{20} peut être mis sous la forme :

$$Q_{20} = Q_{20}^{(1)} + Q_{20}^{(2)} + 2 \frac{A_1 A_2}{A} D^2 , \quad (\text{C-38})$$

dont on déduit que le moment quadrupolaire Q_{20} du système fissionnant est complètement déterminé par la configuration de scission de paramètres $(A_i, Q_{20}^{(i)}, D)$.

ANNEXE D

Propriétés de l'opérateur de renversement du temps

D.1 Définition générale dans l'espace des états à une particule de spin non nul

L'opérateur de renversement du temps, noté \hat{T} indépendamment de son espace d'action, est un opérateur défini à une phase arbitraire près par la loi de transformation des variables fondamentales que sont la position \mathbf{r} , l'impulsion \mathbf{p} et le spin \mathbf{s} :

$$\hat{T} \mathbf{r} \hat{T}^\dagger = \mathbf{r} \quad (\text{D-1})$$

$$\hat{T} \mathbf{p} \hat{T}^\dagger = -\mathbf{p} \quad (\text{D-2})$$

$$\hat{T} \mathbf{s} \hat{T}^\dagger = -\mathbf{s} . \quad (\text{D-3})$$

La transformation associée à cet opérateur change le signe des relations de commutation entre une composante de l'opérateur position et celle canoniquement conjuguée de l'opérateur impulsion. Par conséquent, \hat{T} est un opérateur antiunitaire, autrement dit il est antilinéaire et son inverse est égal à son propre adjoint :

$$\hat{T} \hat{T}^\dagger = \hat{T}^\dagger \hat{T} = \mathbf{1} . \quad (\text{D-4})$$

Avec un choix convenable de phase, on peut identifier l'opérateur de renversement du temps agissant dans l'espace des états à une particule **sans spin** à l'opérateur de conjugaison complexe noté \hat{K}_0 . Dans le cas général (avec spin), suivant la convention de Messiah [60], ce dernier agit sur les variables fondamentales comme :

$$\hat{K}_0 \mathbf{r} \hat{K}_0^\dagger = \mathbf{r} \quad \hat{K}_0 \mathbf{p} \hat{K}_0^\dagger = -\mathbf{p} \quad (\text{D-5})$$

$$\hat{K}_0 \hat{s}_x \hat{K}_0^\dagger = \hat{s}_x \quad \hat{K}_0 \hat{s}_y \hat{K}_0^\dagger = -\hat{s}_y \quad \hat{K}_0 \hat{s}_z \hat{K}_0^\dagger = \hat{s}_z . \quad (\text{D-6})$$

L'opérateur \hat{K}_0 étant antiunitaire, il existe un opérateur linéaire et unitaire \hat{U} tel que :

$$\hat{T} = \hat{U} \hat{K}_0 . \quad (\text{D-7})$$

Comme $\hat{K}_0^\dagger = \hat{K}_0$, donc $\hat{U} = \hat{T} \hat{K}_0$ et $\hat{U}^\dagger = \hat{K}_0 \hat{T}^\dagger$, la transformation unitaire par \hat{U} donne :

$$\hat{U} \mathbf{r} \hat{U}^\dagger = \mathbf{r} \quad \hat{U} \mathbf{p} \hat{U}^\dagger = -\mathbf{p} \quad (\text{D-8})$$

$$\hat{U} \hat{s}_x \hat{U}^\dagger = \hat{s}_x \quad \hat{U} \hat{s}_y \hat{U}^\dagger = -\hat{s}_y \quad \hat{U} \hat{s}_z \hat{U}^\dagger = \hat{s}_z . \quad (\text{D-9})$$

Les expressions (D-8) et (D-9) sont les relations de transformation des variables fondamentales par une rotation du spin seul d'un angle π autour de l'axe (Oy) , dont l'opérateur $\hat{Y}^{(s)}$ associé s'écrit :

$$\hat{Y}^{(s)} = e^{-i\pi \hat{s}_y / \hbar} . \quad (\text{D-10})$$

Par suite, l'opérateur \hat{U} ne diffère de $\hat{Y}^{(s)}$ que par un facteur de phase arbitraire. Suivant toujours la convention de Messiah, on le choisit égal à 1, autrement dit on identifie \hat{U} à $\hat{Y}^{(s)}$, ce qui conduit à l'expression suivante de \hat{T} :

$$\hat{T} = e^{-i\pi \hat{s}_y / \hbar} \hat{K}_0 . \quad (\text{D-11})$$

D.2 Généralisation à N particules de spin non nul

On définit l'opérateur de conjugaison complexe dans l'espace \mathcal{H}_N des états à N particules comme le produit tensoriel de N opérateurs \hat{K}_0 agissant chacun dans \mathcal{H}_1 . Par commodité, on garde la notation \hat{K}_0 pour ce nouvel opérateur. Quant à l'opérateur de spin suivant y agissant dans \mathcal{H}_N , il est construit comme :

$$\hat{S}_y = \hat{s}_y \otimes \mathbf{1}_{\mathbf{s}_y} \cdots \otimes \mathbf{1}_{\mathbf{s}_y} + \mathbf{1}_{\mathbf{s}_y} \otimes \hat{s}_y \otimes \mathbf{1}_{\mathbf{s}_y} \cdots \otimes \mathbf{1}_{\mathbf{s}_y} + \cdots , \quad (\text{D-12})$$

donc la généralisation de l'expression (D-11) s'écrit, avec la même notation pour l'opérateur de renversement du temps agissant dans \mathcal{H}_N :

$$\hat{T} = e^{-i\pi \hat{S}_y / \hbar} \hat{K}_0 . \quad (\text{D-13})$$

Puisque les fermions ont un spin demi-entier et les bosons un spin entier, cet opérateur n'est pas nécessairement involutif. En effet, son carré est égal à :

$$\hat{T}^2 = e^{-2i\pi \hat{S}_y / \hbar} = (-1)^n \quad (\text{D-14})$$

où n est le nombre de fermions parmi les N particules du système considéré. On en déduit que \hat{T} est soit hermitique (n pair), soit anti-hermitique (n impair) :

$$\hat{T}^\dagger = (-1)^n \hat{T} . \quad (\text{D-15})$$

D.3 Eléments de matrice de moment angulaire et renversement du temps

Soit \hat{J}_ν l'une quelconque des composantes cartésiennes de l'opérateur de moment angulaire $\hat{\mathbf{J}}$ et $|\bar{k}\rangle$ l'état conjugué de $|k\rangle$ par renversement du temps, c'est-à-dire :

$$|\bar{k}\rangle = \hat{T} |k\rangle . \quad (\text{D-16})$$

Comme \hat{T} est antilinéaire et compte tenu de la propriété (D-15), il vient :

$$\begin{aligned}\langle \bar{i} | \hat{J}_\nu | k \rangle &= (\langle i | \hat{T}^\dagger) | \hat{J}_\nu | k \rangle \\ &= -\langle i | (\hat{T} \hat{J}_\nu | k \rangle)^* .\end{aligned}\tag{D-17}$$

Or \hat{J}_ν est hermitique et anticommute avec \hat{T} (on peut le montrer par utilisation des relations (D-1) à (D-3) et de la définition $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{s}}$), donc on obtient :

$$\langle \bar{i} | \hat{J}_\nu | k \rangle = \langle i | \hat{J}_\nu | \bar{k} \rangle^* = \langle \bar{k} | \hat{J}_\nu | i \rangle .\tag{D-18}$$

La relation (D-18) satisfaite par cet élément de matrice de \hat{J}_ν reste valable pour tout opérateur hermitique et linéaire qui anticommute avec \hat{T} , en particulier pour l'opérateur pseudo-projeté $\hat{A}_\delta \hat{J}_\nu \hat{A}_\delta$, ce qui démontre la relation (VII-50).

ANNEXE E

Théorème de Wick faible généralisé

E.1 Contractions

Considérons les opérateurs de création a_i et d'annihilation a_i^\dagger d'un fermion dans l'état $|i\rangle$, vérifiant les relations d'anticommutation suivantes :

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \quad (\text{E-1})$$

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (\text{E-2})$$

où l'on a introduit l'anticommutateur

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \quad (\text{E-3})$$

Le produit normal d'un nombre quelconque d'opérateurs de ce type est défini comme le produit obtenu en plaçant les opérateurs de création à gauche des opérateurs d'annihilation et en multipliant le tout par une phase égale à la signature de la permutation faisant passer de l'ordre initial à l'ordre normal. Il est noté : $c_1 \cdots c_n$: dans le cas général de n opérateurs de type quelconque. On définit la contraction d'un produit de deux opérateurs de création et/ou d'annihilation comme la différence entre leur produit normal et leur produit :

$$\underline{c_1 c_2} = : c_1 c_2 : - c_1 c_2. \quad (\text{E-4})$$

Il résulte de ces définitions ainsi que des propriétés (E-1) et (E-2) que :

$$\underline{a_i a_j} = \underline{a_i^\dagger a_j^\dagger} = \underline{a_i^\dagger a_j} = 0 \quad (\text{E-5})$$

$$\underline{a_i a_j^\dagger} = \delta_{ij}. \quad (\text{E-6})$$

La contraction de deux opérateurs est donc un nombre, que l'on peut en fait identifier à la valeur moyenne du produit des deux opérateurs dans le vide de particules $|0\rangle$. En effet, d'après la définition ci-dessus et par linéarité de la valeur moyenne, il vient par exemple :

$$\langle 0 | a_i a_j^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \underline{a_i a_j^\dagger} | 0 \rangle + \langle 0 | : a_i a_j^\dagger : | 0 \rangle = \langle 0 | \underline{a_i a_j^\dagger} | 0 \rangle - \langle 0 | a_j^\dagger a_i | 0 \rangle. \quad (\text{E-7})$$

Or, par définition de l'action d'un opérateur d'annihilation sur le vide $|0\rangle$, le deuxième terme du membre de droite s'annule. Compte tenu que la contraction est un nombre, on obtient finalement l'identité annoncée :

$$\underline{a_i a_j^\dagger} = \langle 0 | a_i a_j^\dagger | 0 \rangle . \quad (\text{E-8})$$

E.2 Valeur moyenne d'un opérateur à N corps dans le vide de particules

Dans sa version « forte » (dans le sens où il porte sur les opérateurs), le théorème de Wick permet de décomposer le produit d'opérateurs de création et d'annihilation en une somme de produits de contractions et de produits normaux.

Dans sa version « faible », il concerne la valeur moyenne d'un produit de n opérateurs d'annihilation $a_{i_1} \cdots a_{i_n}$ et n opérateurs de création $a_{j_1}^\dagger \cdots a_{j_n}^\dagger$ dans le vide de particules $|0\rangle$. Dans le cas particulier d'un opérateur à N corps constitué de N opérateurs d'annihilation suivis de N opérateurs de création notés de la façon symétrique suivante, le théorème s'écrit :

$$\langle 0 | a_{i_N} \cdots a_{i_1} a_{j_1}^\dagger \cdots a_{j_N}^\dagger | 0 \rangle = \sum_{P \in \mathcal{P}_N} (-1)^{\sigma(P)} \prod_{k=1}^N \underline{a_{i_k} a_{P(j_k)}^\dagger} \quad (\text{E-9})$$

où \mathcal{P}_N est l'ensemble des permutations P de N éléments, et $\sigma(P)$ est la signature de P .

E.3 Valeur moyenne d'un opérateur à N corps dans le quasi-vide de BCS

On peut généraliser le théorème de Wick faible ci-dessus en l'étendant aux opérateurs de création et d'annihilation de quasi-particules obtenus par une transformation linéaire et canonique (c'est-à-dire conservant les relations d'anticommutation) des opérateurs de particules a_i et a_j^\dagger . Une telle transformation est appelée transformation de Bogoliubov et définit de nouveaux opérateurs b_i^\dagger et b_i (appelés opérateurs de quasi-particules) par :

$$\begin{aligned} b_i^\dagger &= \sum_k (X_{ik} a_k^\dagger + Y_{ik} a_k) \\ b_i &= \sum_k (X_{ik}^* a_k + Y_{ik}^* a_k^\dagger) . \end{aligned} \quad (\text{E-10})$$

On peut alors définir un état $|\tilde{0}\rangle$ tel que

$$\forall i, b_i |\tilde{0}\rangle = 0 . \quad (\text{E-11})$$

Il est appelé vide de quasi-particules ou quasi-vide.

Dans le cas particulier où le jeu d'états à une particule considéré est composé de couples d'états $(|i\rangle, |\bar{i}\rangle)$ conjugués par renversement du temps (voir annexe D), de sorte que la matrice X soit diagonale et que seuls les éléments de matrice $Y_{k\bar{k}}$ soient non nuls :

$$b_i^\dagger = u_i a_i^\dagger - v_i a_{\bar{i}} , \quad (\text{E-12})$$

le vide de quasi-particules associé n'est autre que l'état BCS (I-56). Une telle transformation est appelée transformation de Bogoliubov-Valatin.

Par extension de la notion de contraction définie dans la section E.1, on définit la quasi-contraction de deux opérateurs de particules comme la valeur moyenne de leur produit dans le quasi-vide :

$$\underline{\underline{c_i c_j}} = \langle \tilde{0} | c_i c_j | \tilde{0} \rangle \quad (\text{E-13})$$

où c_i et c_j désignent indifféremment des opérateurs de création ou d'annihilation de particules. Alors le théorème de Wick faible généralisé au quasi-vide s'énonce de la même manière que précédemment à ceci près qu'il faut ici remplacer les contractions par les quasi-contractions qui viennent d'être définies.

Dans le cas de la transformation de Bogoliubov-Valatin, autrement dit pour le quasi-vide de BCS, les quasi-contractions de deux opérateurs de particules s'expriment :

$$\underline{\underline{a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger}} = u_\beta v_\alpha \delta_{\bar{\alpha}\beta} \quad (\text{E-14})$$

$$\underline{\underline{a_\alpha a_\beta}} = u_\alpha v_\beta \delta_{\alpha\bar{\beta}} \quad (\text{E-15})$$

$$\underline{\underline{a_\alpha^\dagger a_\beta}} = v_\alpha^2 \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{E-16})$$

$$\underline{\underline{a_\alpha a_\beta^\dagger}} = u_\alpha^2 \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{E-17})$$

où α et β désignent indifféremment des états notés $|i\rangle$ tels que $v_i > 0$ ou des états notés $|\bar{i}\rangle$ tels que $v_{\bar{i}} < 0$. A l'aide de ces quasi-contractions, on peut donc établir l'expression (I-61) de la valeur moyenne dans un état BCS du hamiltonien $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$, où \hat{K} est un opérateur à un corps et \hat{V} un opérateur à deux corps, ainsi que l'expression (VII-32) de la valeur moyenne de l'opérateur à deux corps $\hat{\mathbf{J}}^2$ projeté.

ANNEXE F

Calcul du potentiel coulombien direct

Rappelons la définition du potentiel coulombien direct (I-15) :

$$V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) = e^2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|}. \quad (\text{F-1})$$

Cette expression est singulière au point $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Pour contourner cette difficulté, on utilise l'identité :

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \frac{2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (\text{F-2})$$

qui permet de développer le potentiel coulombien sous la forme :

$$V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r}' |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \Delta \rho_p(\mathbf{r}') \quad (\text{F-3})$$

après une double intégration par partie.

D'après la référence [81], on peut décomposer $\Delta \rho_p$ sous la forme :

$$\Delta \rho_p(\mathbf{r}') = \sum_{n=0} D_p^{(2n)}(r', z') \cos 2n\theta' \quad (\text{F-4})$$

où les $D_p^{(2n)}$ sont pairs en z . A partir de la norme $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ qui se développe, en coordonnées cylindriques (r, θ, z) , comme :

$$\|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\| = ((z - z')^2 + (r + r')^2)^{1/2} \left(1 - k^2 \cos^2 \frac{(\theta' - \theta)}{2} \right)^{1/2} \quad (\text{F-5})$$

où on a posé

$$k^2 = \frac{4rr'}{(z - z')^2 + (r + r')^2}, \quad (\text{F-6})$$

le potentiel coulombien s'exprime comme une somme d'intégrales $I^{(2n)}$ définies par :

$$I^{(2n)} = \frac{e^2}{2} \int_0^\infty dr' \int_{-\infty}^\infty dz' r' \left((z - z')^2 + (r + r')^2 \right)^{1/2} D_p^{(2n)}(r', z') \int_0^{2\pi} d\theta' \left(1 - k^2 \cos^2 \frac{(\theta' - \theta)}{2} \right)^{1/2} \cos 2n\theta'. \quad (\text{F-7})$$

La partie angulaire de cette intégrale peut s'écrire plus simplement en effectuant le changement de variable $u = (\theta' - \theta)/2$. Elle devient :

$$J^{(2n)} = 2 \int_0^\pi du \left(1 - k^2 \cos^2 u \right)^{1/2} \cos(4nu + 2n\theta) \quad (\text{F-8})$$

car l'intégrand est une fonction périodique de période π . En développant le cosinus dans cette dernière expression, cette intégrale se sépare en deux termes. Le premier est proportionnel à $\cos 2n\theta$ et se met sous la forme :

$$J^{(2n)} = 4 \cos 2n\theta \int_0^{\pi/2} du \left(1 - k^2 \cos^2 u \right)^{1/2} \cos 4nu \quad (\text{F-9})$$

où on a réduit l'intervalle d'intégration, car l'intégrand est une fonction symétrique par rapport à $\pi/2$. Le deuxième terme est proportionnel à $\sin 2n\theta$ et s'écrit :

$$K^{(2n)} = 4 \sin 2n\theta \int_0^\pi du \left(1 - k^2 \cos^2 u \right)^{1/2} \sin 4nu. \quad (\text{F-10})$$

Ce terme est nul, car l'intégrand est anti-symétrique par rapport à $\pi/2$. On peut donc réécrire $I^{(2n)}$ sous la forme :

$$I^{(2n)} = 2e^2 \cos 2n\theta \int_0^\infty dr' \int_{-\infty}^\infty dz' r' \left((z - z')^2 + (r + r')^2 \right)^{1/2} D_p^{(2n)}(r', z') \int_0^{\pi/2} du \left(1 - k^2 \cos^2 u \right)^{1/2} \cos 4nu \quad (\text{F-11})$$

où la dépendance en θ est factorisée en dehors de l'intégrale. Le potentiel coulombien se déduit donc directement sous forme d'une série de Fourier :

$$V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) = \sum_{n=0} V_c^{(2n)}(r, z) \cos 2n\theta \quad (\text{F-12})$$

avec

$$V_c^{2n}(r, z) = 2e^2 \int_0^\infty dr' \int_{-\infty}^\infty dz' r' \left((z - z')^2 + (r + r')^2 \right)^{1/2} D_p^{(2n)}(r', z') \int_0^{\pi/2} du \left(1 - k^2 \cos^2 u \right)^{1/2} \cos 4nu. \quad (\text{F-13})$$

Dans le cas de la symétrie axiale, les sommes (F-4) et (F-12) se réduisent aux termes en $n = 0$, si bien que :

$$V_{\text{dir}}(r, z) = 2e^2 \int_0^\infty dr' \int_{-\infty}^\infty dz' r' \left((z - z')^2 + (r + r')^2 \right)^{1/2} \Delta \rho_p(r', z') \int_0^{\pi/2} du \left(1 - k^2 \cos^2 u \right)^{1/2}, \quad (\text{F-14})$$

soit après le changement de variable $v = u - \frac{\pi}{2}$:

$$\begin{aligned}
 V_{\text{dir}}(\eta, \xi) &= 2e^2 \int_0^\infty dr' \int_{-\infty}^\infty dz' r' \left((z - z')^2 + (r + r')^2 \right)^{1/2} \Delta \rho_p(r', z') \\
 &\quad \int_{-\pi/2}^0 dv (1 - k^2 \sin^2 v)^{1/2} \\
 &= 2e^2 \int_0^\infty dr' \int_{-\infty}^\infty dz' r' \left((z - z')^2 + (r + r')^2 \right)^{1/2} \Delta \rho_p(r', z') E(k), \quad (\text{F-15})
 \end{aligned}$$

qui fait intervenir l'intégrale elliptique de seconde espèce $E(k)$ (voir par exemple [139]) :

$$E(k) = \int_{-\pi/2}^0 dv (1 - k^2 \sin^2 v)^{1/2}, \quad (\text{F-16})$$

et qui correspond à l'expression donnée par Vautherin [30].

Table des figures

I.1	Spectres individuels des neutrons et protons dans l' ^{234}U avec les interactions de Skyrme SIII et SkM* au minimum ND.	11
II.1	Courbes d'énergie de déformation du ^{252}Cf pour différentes valeurs de N_0 dans l'approche HF(SkM*)+BCS(G).	34
II.2	Courbes de variation de la fonction de poids G_{ξ_0} en fonction de ξ pour trois valeurs du paramètres ξ_0	41
II.3	Courbes d'énergie de déformation du ^{32}S et d'énergie coulombienne entre deux noyaux d' ^{16}O en fonction du moment quadrupolaire de masse en barns, et variation du moment quadrupolaire des fragments le long du chemin de déformation.	42
II.4	Contours d'isodensité dans un plan méridien (contenant la direction de fission z) associés à une configuration du ^{32}S correspondant à deux noyaux d' ^{16}O dont les centres de masse sont distants de $D = 17.68$ fm.	43
II.5	Carré des fonctions d'onde Ψ_{n_z} (à une constante multiplicative près) d'une base à 3 centres avec $n_z = 0$ et $n_z = 10$	45
III.1	Courbes d'énergie de déformation de deux isotopes du Thorium, deux isotopes de l'Uranium et d'un isotope du Plutonium, et de cinq isotopes du Californium dans le formalisme HF(SkM*)+BCS(G).	50
III.2	Courbes d'énergie de déformation de treize isotopes du Fermium et de trois isotopes du Nobelium dans le formalisme HF(SkM*)+BCS(G).	51
III.3	Valeur moyenne de l'opérateur $\hat{\mathbf{J}}^2$ (en unités d' \hbar^2) et moment d'inertie \mathcal{I}_{Bel} calculé par la formule de Belyaev (en unités d' $\hbar^2\text{MeV}^{-1}$) en fonction de Q_{20} (en barns) dans l'approche HF(SkM*)+BCS(G) pour cinq isotopes du Californium.	60
III.4	Hauteurs calculées de la seconde barrière symétrique (en MeV) incluant la correction rotationnelle (partie supérieure) et temps de vie de fission mesurés en secondes (partie inférieure) d'isotopes pairs du Fermium.	60
III.5	Première barrière des isotopes ^{234}U , ^{236}U , ^{240}Pu et ^{252}Cf dans le formalisme HF(SkM*)+BCS(G) sans la correction rotationnelle.	61
III.6	Coupes de la surface d'énergie potentielle de déformation du ^{252}Cf en fonction de Q_{22} (en fm^2) à différentes elongations Q_{20} autour du sommet de la première barrière.	62
III.7	Valeurs de Q_{40} (en barns ²) en fonction de Q_{20} (en barns) correspondant à des calculs asymétriques comparées à celles obtenues dans des calculs symétriques, pour les quatre isotopes ^{234}U , ^{236}U , ^{240}Pu et ^{252}Cf	63
III.8	Courbes d'énergie de déformation des isotopes $^{230,232}\text{Th}$, $^{234,236}\text{U}$, ^{240}Pu et ^{252}Cf dans le formalisme HF(SkM*)+BCS(G) sans correction rotationnelle.	64
III.9	Coupes de la surface d'énergie potentielle de déformation en fonction du moment octupolaire axial Q_{30} (en barns ^{3/2}) pour le ^{252}Cf à différentes elongations autour du sommet de la seconde barrière.	65

III.10	Comparaison des courbes d'énergie de déformation de cinq noyaux dans les formalismes HF(SkM*)+BCS(G) et HF(SkM*)+BCS(δ) sans correction rotationnelle.	66
III.11	Courbes d'énergie de déformation des deux isotopes ^{250}Cf et ^{252}Cf du Californium dans le formalisme HF(SkM*)+BCS(δ).	67
III.12	Energies d'appariement des neutrons, protons et totale obtenues par des calculs HF(SkM*)+BCS(δ) au niveau de la seconde barrière du ^{250}Cf	67
III.13	Identique à la figure III.11 pour les isotopes $^{256,260}\text{Fm}$ et ^{254}No	68
III.14	Courbes d'énergie de déformation en fonction de Q_{20} avec et sans correction approchée de la dépendance en déformation de l'interaction d'appariement pour l' ^{234}U et le ^{252}Cf	69
IV.1	Courbes d'énergies de déformation de l' ^{234}U et du ^{252}Cf obtenues dans les formalismes HTDA(δ) et HF+BCS(G) sans le traitement de la dépendance en déformation de l'appariement ni la correction rotationnelle, dans le cas de solutions symétriques de révolution et de réflexion.	72
IV.2	Courbes d'énergie de déformation obtenues dans les formalismes HTDA(δ) avec et sans traitement de la dépendance en déformation de l'appariement et sans la correction rotationnelle, pour l' ^{234}U et le ^{252}Cf	73
V.1	Vallées de fission et de fusion dans le ^{252}Cf , obtenues par des calculs brisant la symétrie de réflexion et sans correction rotationnelle avec une taille de base $N_0 = 16$	78
V.2	Contours de densité nucléaire totale (neutrons+protons) dans les vallées de fission et de fusion du noyau fissionnant ^{252}Cf	79
V.3	Exemple de configuration de scission du noyau fissionnant ^{252}Cf	81
V.4	Exemple de configuration de scission du ^{252}Cf au sens de P. Möller et A. Sierk [111].	82
V.5	Partie supérieure : courbes d'énergie de configuration en fonction de la masse du fragment lourd pour l' ^{236}U et le ^{240}Pu . Partie inférieure : distributions de masse expérimentales en fission induite par neutrons thermiques pour l' ^{236}U et en fission spontanée pour le ^{240}Pu extraites de [115].	85
V.6	Distribution de masse expérimentale (avant émission de neutrons) dans la fission spontanée du ^{252}Cf pour des fragmentations très asymétriques [116].	86
V.7	Identique à la figure V.5 pour le ^{244}Cm et le ^{252}Cf	87
V.8	Partie gauche : identique à la partie supérieure de la figure V.5 pour le ^{258}Fm et le ^{258}No . Partie droite : distributions expérimentales en fission spontanée du ^{258}Fm et du ^{258}No respectivement, extraites de [114].	88
V.9	Identique à la partie supérieure de la figure V.5 pour le ^{232}Th , le ^{250}Fm et le ^{254}No	88
V.10	Partie supérieure : variation des masses les plus probables du fragment lourd et du léger obtenues dans nos calculs en fonction de la masse A du système fissionnant. Partie inférieure : variation des masses moyennes des fragments lourd et léger en fonction de A (données expérimentales extraites de [122]).	89

VIII.1	Courbes d'énergie de déformation à symétries de révolution et de réflexion des fragments primaires considérés dans ce chapitre (^{106}Mo à gauche et ^{146}Ba à droite), obtenues avec $N_0 = 12$ et les paramètres de base b et q déduits du modèle de la goutte liquide (voir les expressions de b et q dans la référence [79]).	120
VIII.2	Courbe de variation de J_{frag} (en unités d' \hbar) en fonction de l'énergie d'excitation totale et de la multiplicité totale de neutrons de post-scission.	123
VIII.3	Valeurs expérimentales du moment angulaire moyen des fragments primaires de Mo (partie supérieure) et de Ba (partie inférieure) en fonction du nombre total de neutrons prompts ν_{tot} correspondant à des événements de fission spontanée du ^{252}Cf où le fragment secondaire léger est le noyau ^{104}Mo (reproduction de la figure 2 de la référence [47]).	123
C.1	Coupe longitudinale de la surface à bord abrupt d'un noyau à symétrie cylindrique.	141
C.2	Coupes longitudinales de la densité et de la surface à bord abrupt des fragments primaires d'un noyau fissionnant	145

Liste des tableaux

II.1	Hauteurs (en MeV) de la première barrière E_A et de la deuxième E_B , et énergie relative E_{II} de l'état super-déformé par rapport au minimum normalement déformé du ^{252}Cf obtenues avec différentes valeurs de N_0	35
II.2	Energies relatives non symétriques $E_{n.s}^*$ (en MeV) calculées dans l'approximation HF(SkM*)+BCS(G) par rapport au minimum ND, évaluées dans différents processus d'optimisation (sans correction rotationnelle).	36
II.3	Hauteurs de barrières de fission HF(SkM*)+BCS(G) évaluées dans le cadre de processus différents d'optimisation de la base utilisant deux valeurs distinctes de N_0 , sans correction rotationnelle, dans deux noyaux (^{236}U et ^{252}Cf). . .	37
II.4	Hauteur de la première barrière de fission (en MeV) du ^{252}Cf (sans correction rotationnelle) obtenues avec différentes valeurs de N_F et valeurs de Q_{22} correspondantes.	37
II.5	Hauteurs de la première barrière E_A et de la deuxième barrière E_B de fission du ^{252}Cf calculées en MeV avec $N_0 = 16$ et différents nombre de points de Gauss $N_G^{(z)}$ et $N_G^{(r)}$	40
II.6	Energie totale déformation (en MeV) du ^{32}S à $Q_{20} = 50$ b calculée pour différentes valeurs de q et z_0 avec la base à 2 centres et la force de Skyrme SIII comme dans la référence [92], dans le cas axial et symétrique de réflexion sans correction rotationnelle ni du centre masse.	44
II.7	Energie de déformation du ^{32}S calculée à $Q_{20} = 50$ b pour différentes valeurs de q avec la base de l'oscillateur harmonique dans les conditions du tableau II.6, exceptés les degrés des méthodes d'intégration qui valent ici $N_G^{(z)} = 50$ et $N_G^{(r)} = 16$	44
III.1	Energies relatives (en MeV) de la première barrière, du minimum super-déformé et de la seconde barrière par rapport à l'énergie du minimum normalement déformé pour 26 noyaux calculés dans l'approche HF(SkM*)+BCS(G).	59
III.2	Hauteurs de barrières et énergies isomériques (en MeV) expérimentales (lorsqu'elles sont disponibles) et théoriques (HF(SkM*)+BCS(G)+correction rotationnelle) de six noyaux lourds.	63
III.3	Energies relatives HF(SkM*)+BCS(G) et HF(SkM*)+BCS(δ) (en MeV) de la première barrière, du minimum SD et de la deuxième barrière par rapport à l'énergie du minimum ND pour cinq noyaux : ^{250}Cf , ^{252}Cf , ^{256}Fm , ^{260}Fm et ^{254}No	69
III.4	Hauteurs de barrière E_A et E_B avec (corr.) ou sans (non corr.) correction de la dépendance en déformation pour l' ^{234}U et le ^{252}Cf	70
IV.1	Hauteurs E_A de la première et E_B de la deuxième barrière de fission et énergie relative du minimum SD par rapport au minimum ND obtenues dans les conditions de calcul précisées dans la légende de la figure IV.2 pour les deux traitements de l'appariement (HTDA(δ) et BCS(G)).	72

IV.2	Hauteurs E_A de la première et E_B de la deuxième barrière de fission et énergie relative du minimum SD par rapport au minimum ND obtenues dans les conditions de calcul précisées dans la légende de la figure IV.2 pour les deux traitements de l'appariement (HTDA(δ) et BCS(G)).	74
VIII.1	Multiplicité totale moyenne des neutrons et spin des fragments de fission (et son incertitude) pour la fragmentation $^{252}\text{Cf} \longrightarrow ^{106}\text{Mo} + ^{146}\text{Ba}$ en fonction de l'énergie d'excitation E^* des fragments, à une interdistance fixée à $d = (4.67 \pm 0.02)$ fm.	122

Bibliographie

- [1] J. Chadwick, Proc. Roy. Soc. **A136** (1932) 692.
- [2] E. Fermi, F. Rasetti, O. D'Agostino, Ric. Scient. **5(1)** (1934) 533.
- [3] L. Meitner, O. Hahn, F. Strassman, Z. Phys. **106** (1937) 249.
- [4] I. Curie, P. Savitch, Jour. Phys. et Radium **9** (1938) 355.
- [5] O. Hahn, F. Strassman, Naturwiss. **27** (1939) 11.
- [6] L. Meitner, O. R. Frisch, Nature (London) **143** (1939) 239, paru le 11 février et daté du 16 janvier 1939.
- [7] N. Bohr, F. Kalckar, Det. Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. **14** (1937) 1.
- [8] N. Bohr, J. A. Wheeler, Phys. Rev. **56** (1939) 426, daté du 28 juin 1939.
- [9] Page 277 de la référence [13].
- [10] I. Noddack, Angewandte Chemie **47** (1934) 653.
- [11] W. Noddack, I. Tacke, O. Berg, Naturwiss. **13** (1925) 567.
- [12] P. H. M. Van Assche, Naturwiss. **A480** (1988) 205.
- [13] E. Amaldi, Phys. Rep. **111** (1984) 1-332.
- [14] H. A. Bethe, Rev. Mod. Phys. **9** (1937) 69.
C. F. von Weizsäcker, Z. Phys. **96** (1935) 431.
- [15] Lord J. W. S. Rayleigh, Philosophical Magazine **XX** (1882) 184.
- [16] S. Cohen, W. J. Swiatecki, Ann. Phys. **22** (1963) 406.
- [17] W. D. Myers, W. J. Swiatecki, Ann. Phys. (New York) **55** (1969) 395.
- [18] O. Haxel, J. H. D. Jensen, H. E. Suess, Phys. Rev. **75** (1949) 1766.
- [19] J. Rainwater, Phys. Mod. Rev. **48** (1950) 385.
- [20] S. G. Nilsson, Det. Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. **29**, N°16 (1955) .
- [21] A. Bohr, B. Mottelson, Det. Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. **30**, N°1 (1955) .
- [22] W. D. Myers, W. J. Swiatecki, Nucl. Phys. **81** (1966) 1.
- [23] S. G. Nilsson, C. F. Tsang, A. Sobiczewski, Z. Szymanski, S. Wycech, C. Gustafson, I.-L. Lamm, P. Möller, B. Nilsson, Nucl. Phys. **A131** (1969) 1.

- [24] M. Brack, J. Damgaard, A. S. Jensen, H. C. Pauli, V. M. Strutinsky, C. W. Wong, *Rev. Mod. Phys.* **44** (1972) 320.
- [25] M. Bolsterli, E. O. Fiset, J. R. Nix, N. J. L, *Phys. Rev.* **C5** (1972) 1050.
- [26] P. Möller, *Nucl. Phys.* **A192** (1972) 1529.
- [27] P. Möller, J. R. Nix, *Proc. IAEA Symp. Phys. Chem. of fission*, Vol. I, Rochester, 1973, p. 103.
- [28] S. Polikanov, *Sov. Phys. JETP* **15** (1962) 1016.
- [29] D. Vautherin, D. M. Brink, *Phys. Rev.* **C5** (1972) 626.
- [30] D. Vautherin, *Phys. Rev.* **C7** (1973) 296.
- [31] P. Quentin, *J. Physique* **34** (1973) C4–101.
- [32] H. Flocard, P. Quentin, D. Vautherin, M. Vénérone, A. K. Kerman, *Nucl. Phys.* **A231** (1974) 176.
- [33] M. Brack, P. Quentin, *Nucl. Phys.* **A361** (1981) 31.
- [34] J.-F. Berger, M. Girod, D. Gogny, *Nucl. Phys.* **A428** (1984) 23c.
- [35] J.-F. Berger, M. Girod, D. Gogny, *Nucl. Phys.* **A502** (1989) 85c.
- [36] J. L. Egido, L. M. Robledo, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 1198.
- [37] M. Warda, J. L. Egido, L. M. Robledo, K. Pomorski, *Phys. Rev.* **C66** (2002) 014310.
- [38] J. D. Walecka, *Ann. Phys.* **83** (1974) 491.
- [39] J. Boguta, A. R. Bodmer, *Nucl. Phys.* **A292** (1977) 413.
- [40] K. Rutz, J. Maruhn, P. G. Reinhard, W. Greiner, *Nucl. Phys.* **A590** (1995) 680.
- [41] C. R. Guet, *Proc. Int. Symp. Physics and Chemistry of Fission*, Vol. II, IAEA, 1980, p. 247.
- [42] J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet, H.-B. Håkansson, *Nucl. Phys.* **A386** (1982) 79.
- [43] J. O. Rasmussen, W. Nörenberg, H. J. Mang, *Nucl. Phys.* **A136** (1969) 465.
- [44] M. Zielinska-Pfabé, K. Dietrich, *Phys. Lett.* **B49** (1974) 123.
- [45] J. R. Nix, W. J. Swiatecki, *Nucl. Phys.* **71** (1965) 1.
- [46] G. M. Ter Akopian *et al.*, *Phys. Rev.* **C55** (1997) 1146.
- [47] G. M. Ter Akopian *et al.*, *Proc. of the 2nd Int. Conf. on Fission and Properties of Neutron-Rich Nuclei*, Saint-Andrews, Scotland (1999) 98.
- [48] I. N. Mikhailov, P. Quentin, *Phys. Lett.* **B462** (1999) 7.
- [49] V. M. Strutinsky, *Nucl. Phys.* **A95** (1967) 420; **A122** (1968) 1.
- [50] K. A. Brückner, C. A. Levinson, *Phys. Rev.* **97** (1955) 1344.
- [51] K. A. Brückner, J. L. Gammel, H. Weitzner, *Phys. Rev.* **110** (1958) 431.
- [52] J. W. Negele, *Phys. Rev.* **C1** (1970) 1260.
- [53] X. Campi, D. W. L. Sprung, *Nucl. Phys.* **A194** (1972) 401.
- [54] D. Gogny, *Contribution 2-12 à Int. Conf. on Nucl. Phys.*, Munich, 1973.
J. Dechargé, D. Gogny, *Phys. Rev.* **C21** (1980) 1568.
- [55] S. A. Moskowsky, *Phys. Rev.* **C2** (1970) 402.

- [56] T. H. R. Skyrme, *Phil. Mag.* **1** (1956) 1043.
- [57] P. Quentin, H. Flocard, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **28** (1978) 523.
- [58] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **81** (1951) 385.
- [59] P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many-body Problem*, Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [60] A. Messiah, *Mécanique Quantique*, Vol. 2, Dunod, Paris, Ed. 1995, p. 539.
- [61] T. Duguet, *Problème à N corps nucléaire et force effective dans les méthodes de champ moyen auto-cohérent*, Thèse de Troisième Cycle, Université Pierre et Marie Curie Paris VI (2002) .
- [62] P. Quentin, *Description self-consistante des propriétés statiques de déformation nucléaire à partir d'interactions effectives nucléon-nucléon*, Thèse d'Etat, Université de Paris-Sud, Centre d'Orsay (1975) .
- [63] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn, *Eur. Phys. J.* **A7** (2000) 467.
- [64] H. J. Lipkin, *Ann. Phys. (New York)* **9** (1960) 272.
- [65] I. N. Mikhaïlov, *Izvestia Académie des Sciences de l'URSS, Série Physique*, Tome XXX, N° 7 (1966) 1118 (en Russe).
- [66] I. Kelson, Y. Shoshani, *Phys. Lett.* **40B** (1972) 58.
- [67] R. E. Peierls, J. Yoccoz, *Proc. Phys. Soc. London* **A70** (1957) 381.
- [68] P.-H. Heenen, communication privée .
- [69] D. W. L. Sprung, S. G. Lie, M. Vallières, P. Quentin, *Nucl. Phys.* **A326** (1979) 37.
- [70] S. D. Belyaev, *Nucl. Phys.* **24** (1961) 322, et références incluses.
- [71] J.-F. Berger, *Approches de champ moyen et au-delà*, Ecole de Physique Joliot-Curie (1991).
- [72] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108** (1957) 1175.
- [73] K. Dietrich, *Au-delà du champ moyen*, Ecole de Physique Joliot-Curie (1987).
- [74] J. W. Negele, D. Vautherin, *Phys. Rev.* **C5** (1972) 1472.
- [75] H. Laftchiev, D. Samsœn, P. Quentin, J. Piperova, *Eur. Phys. J.* **A12** (2001) 155.
- [76] S. J. Krieger, P. Bonche, H. Flocard, P. Quentin, M. S. Weiss, *Nucl. Phys.* **A517** (1990) 275.
- [77] T. L. Ha, P. Quentin, D. D. Strottman, article en préparation.
- [78] N. Pillet, P. Quentin, J. Libert, *Nucl. Phys.* **A697** (2002) 141.
- [79] H. Flocard, P. Quentin, A. K. Kerman, D. Vautherin, *Nucl. Phys.* **A203** (1973) 433.
- [80] V. V. Pashkevich, *Nucl. Phys.* **A133** (1969) 400.
S. E. Larsson, I. Ragnarsson, S. G. Nilsson, *Phys. Lett.* **38B** (1972) 269.
U. Götz, H. C. Pauli, K. Junker, *Phys. Lett.* **39B** (1972) 436.
- [81] D. Samsœn, P. Quentin, J. Bartel, *Nucl. Phys.* **A652** (1999) 34.
- [82] P. Möller, S. G. Nilsson, *Phys. Lett.* **31B** (1970) 283.
- [83] V. V. Pashkevich, *Nucl. Phys.* **A169** (1971) 275.
- [84] H. C. Pauli, T. Lederberger, M. Brack, *Phys. Lett.* **34B** (1971) 264.
- [85] M. G. Mustafa, U. Mosel, H. W. Schmitt, *Phys. Rev.* **C7** (1973) 1519.

- [86] N. Pillet, *Corrélations d'appariement et isomères K dans la région $A \sim 178$* , Thèse de Troisième Cycle, Université Bordeaux I (2000) .
- [87] D. J. Rowe, *Nuclear collective motion*, Methuen, London, 1970, Ch. 12.
- [88] M. A. Preston, R. K. Bhaduri, *Structure of the Nucleus*, Addison-Wesley, Reading, Massachussets, 1975, Ch. 10.
- [89] K.-j. Hara, Prog. Theor. Phys. **32** (1964) 88.
D. J. Rowe, Phys. Rev. **175** (1968) 1283.
- [90] C. Lanczös, J. Res. Nat. Bureau Standards **B45** (1950) 225.
E. Sjöström, *Singular value computations for Toeplitz matrices*, PhD thesis, Université de Linköping, Suède (1997), disponible sur :
[http ://www.mai.liu.se/~evlun/pub/lic.ps.gz](http://www.mai.liu.se/~evlun/pub/lic.ps.gz) .
- [91] A. Bohr, B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. II, W. A. Benjamin, New York, 1969, Appendix 6B, p.677.
- [92] H. Flocard, Phys. Lett. **49B** (1974) 129.
- [93] D. Samsøen *et al.*, article en préparation .
- [94] H. Mineur, *Techniques de calcul numérique*, Dunod, Paris, 1966.
- [95] L. Bonneau, P. Quentin, D. Samsøen, soumis à Eur. Phys. J. A .
- [96] P. Reiter *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 509.
- [97] D. Hoffman, Nucl. Phys. **A502** (1989) 21c.
- [98] S. Bjørnholm, J. Lynn, Rev. Mod. Phys. **52** (1980) 725.
- [99] G. N. Smirenkin, IAEA Report (1993) INDC(CCP)–359 ; également disponible sur
[http ://iaeand.iaea.or.at/ripl/](http://iaeand.iaea.or.at/ripl/).
- [100] H. X. Zhang, T. R. Yeh, H. Lancman, Phys. Rev. **C34** (1986) 1397.
- [101] J. Blons, B. Fabbro, C. Mazur, D. Paya, M. Ribrag, Y. Patin, Nucl. Phys. **A477** (1988) 231.
- [102] P. Bonche, S. J. Krieger, M. S. Weiss, J. Dobaczewski, H. Flocard, P.-H. Heenen, Phys. Rev. Lett. **66** (1991) 871.
- [103] P. Möller, J. R. Nix, W. J. Swiatecki, Nucl. Phys. **A469** (1987) 1 ; **A492** (1989) 349.
- [104] P. Möller, A. Iwamoto, Phys. Rev. **C61** (2000) 047602.
- [105] W. Nörenberg, Phys. Rev. **C5** (1972) 2020.
- [106] B. D. Wilkins, E. P. Steinberg, R. R. Chasman, Phys. Rev. **C14** (1976) 1832.
- [107] F. Gönnerwein, B. Börsig, Nucl. Phys. **A530** (1991) 27.
- [108] Ş. Mişicu, P. Quentin, Eur. Phys. J. **A6** (1999) 399.
- [109] T. M. Shneidman, G. G. Adamian, N. V. Antonenko, S. P. Ivanova, R. V. Jolos, W. Scheid, Phys. Rev. **C65** (2002) 064302.
- [110] R. Vandenbosch, Nucl. Phys. **46** (1963) 129.
- [111] P. Möller, communication privée .
A. Sierk, communication privée .
- [112] P. Quentin, J. Physique **30** (1969) 497.
- [113] F. Dickmann, K. Dietrich, Nucl. Phys. **A129** (1969) 241.

- [114] E. K. Hulet *et al.*, Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 313.
- [115] A. C. Wahl *et al.*, IAEA Symp. Phys. Chem. Fission, Vol. I, Salzburg, 1965, p. 317.
- [116] G. Barreau *et al.*, Nucl. Phys. **A432** (1985) 411.
- [117] F. J. Hambsch, S. Oberstedt, Nucl. Phys. **A617** (1997) 347.
- [118] I. Tsekhanovich, H. O. Denschlag, M. Davi, Z. Büyükmumcu, F. Gönnerwein, O. Oberstedt, H. R. Faust, Nucl. Phys. **A688** (2001) 633.
- [119] D. Rochman, I. Tsekhanovich, F. Gönnerwein, V. Sokolov, F. Storrer, G. Simpson, O. Serot, accepté par Nucl. Phys. A .
- [120] H. J. Krappe, S. Fadeev, Nucl. Phys. **A690** (2001) 431.
- [121] K. F. Flynn *et al.*, Phys. Rev. **C6** (1972) 2211.
- [122] K. F. Flynn *et al.*, Phys. Rev. **C5** (1972) 1725.
- [123] G. S. Popeko *et al.*, Proc. int. conf. on fission and properties of neutron-rich nuclei, World Scientific, 1998, p. 645.
- [124] Y. N. Kopach *al.*, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 303.
- [125] J. J. Hoffman, Phys. Rev. **133B** (1964) 714.
- [126] J. O. Rasmussen *et al.*, Proc. Int. Conf. on Fission and Properties of Neutron-Rich Nuclei, World Scientific, 1998, p. 1.
- [127] D. De Frenne, *The Nuclear Fission Process*, CRC Press, Boca Raton, 1991, Ch. 9.
- [128] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. Khersonskii, *Quantum theory of angular momentum*, World Scientific, 1988.
- [129] R. K. Badhuri, S. Das Gupta, Nucl. Phys. **A212** (1973) 18.
- [130] G. Audi, A. H. Wapstra, Nucl. Phys. **A595** (1995) 409.
- [131] S. S. Kapoor, R. Ramanna, P. N. Rama Rao, Phys. Rev. **131** (1963) 283.
- [132] H.-H. Knitter, U. Brosa, Budtz-Jørgensen, *The Nuclear Fission Process*, CRC Press, Boca Raton, 1991, Ch. 11.
- [133] H. Bowman, S. Thompson, J. Milton, W. Swiatecki, Phys. Rev. **126** (1962) 2120.
P. Riehs, Acta Phys. Austriaca **53** (1981) 271.
C. Budtz-Jørgensen, H.-H. Knitter, Proc. semin. fission, BLG 586, SCK Mol, Château de Pont d'Oye, Habay-la-Neuve (Belgique), 1986, p. 91.
C. Budtz-Jørgensen, H.-H. Knitter, Nucl. Phys. **A490** (1988) 307.
O. I. Batenko, A. B. Blinov, M. V. Blinov, S. N. Smirnov, Proc. IAEA Consultants Meet. Physics of Neutron Emission in Fission, INDNS(NDS)-220, IAEA, Vienna, 1989, p. 207.
- [134] N. V. Kornilov, Nucl. Phys. **A686** (2001) 187.
- [135] B. E. Watt, Phys. Rev. **87** (1952) 1037.
- [136] H. Faust, 10th Nuclear Physics Workshop, UMCS, Lublin, Kazimierz Dolny (Pologne) (en cours d'impression), 2003.
- [137] S. C. Wu *et al.*, Phys. Rev. **C62** (2000) 041601.
- [138] I. N. Mikhaïlov, C. Briançon, P. Quentin, article en préparation .
- [139] M. Abramowitz, I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1965, Ch. 17.